



THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par : *l'Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)*

Présentée et soutenue le 15 décembre 2017 par :

Axel BOULAIS

**Méthodes de séparation aveugle de sources et application à l'imagerie
hyperspectrale en astrophysique.**

JURY

SAID MOUSSAOUI
DANIELLE NUZILLARD
PATRICK DANÈS
ALAIN ABERGEL
YANNICK DEVILLE
OLIVIER BERNÉ

Professeur, IRCCyN, Nantes
Professeur, CReSTIC, Reims
Professeur, LAAS, Toulouse
Professeur, IAS, Paris Sud
Professeur, IRAP-SISU, Toulouse
CR, IRAP-MICMAC, Toulouse

Rapporteur
Rapporteur
Président du Jury
Examineur
Directeur de thèse
Directeur de thèse

École doctorale et spécialité :

MITT : Signal, Image, Acoustique et Optimisation

Unité de Recherche :

Institut de Recherche en Astrophysique et Planétologie (IRAP - UMR 5277)

Directeur(s) de Thèse :

Yannick Deville (IRAP) et Olivier Berné (IRAP)

Rapporteurs :

Said Moussaoui (IRCCyN) et Danielle Nuzillard(CReSTIC)

Table des matières

Abréviations	v
Introduction générale	1
1 Contexte et objectifs	1
2 Organisation du manuscrit	2
Chapitre 1 – La Séparation Aveugle de Sources	5
Introduction	7
1.1 Généralités	7
1.2 Modèles de mélange	8
1.2.1 Mélanges Linéaires	8
1.2.2 Mélanges non linéaires	9
1.3 Paramètres complémentaires	10
1.3.1 Estimation du nombre de sources	10
1.3.2 Indéterminations	12
1.4 Méthodes pour les mélanges linéaires instantanés	13
1.4.1 Analyse en Composantes Indépendantes	15
1.4.2 Factorisation en matrices non négatives	16
1.4.3 Analyse en composantes parcimonieuses	23
1.4.4 Inférence bayésienne	34
1.4.5 Méthodes géométriques	35
Conclusion	39
Chapitre 2 – L’imagerie hyperspectrale	41
Introduction	42
2.1 Généralités	42
2.2 Modèle physique de mélange	44
2.2.1 En observation de la Terre	45
2.2.2 En astrophysique	49
2.3 Modèle du cube	51
2.3.1 Modèle spectral	52
2.3.2 Modèle spatial	52
2.3.3 Choix du modèle	53

2.4	Méthodes de SAS en observation de la Terre	53
2.4.1	Panorama des méthodes standard	54
2.4.2	Méthodes géométriques	56
2.5	État de l’art de la SAS en astrophysique	59
2.5.1	Analyse en composantes indépendantes	59
2.5.2	Méthodes bayésiennes	60
2.5.3	Factorisation en matrices non négatives	60
2.5.4	Analyse en composantes parcimonieuses	61
2.6	Étude de nos données et choix méthodologiques	61
2.6.1	Caractéristiques des images hyperspectrales	62
2.6.2	Choix méthodologiques	63
2.6.3	Positionnement de nos travaux	65
	Conclusion	66
Chapitre 3 – Méthodes hybrides SpaceCORR-NMF		67
	Introduction	69
3.1	Limites de SpaceCORR et de la NMF	69
3.2	Approche proposée	70
3.2.1	La méthode SpaceCORR	70
3.2.2	La méthode MC-NMF	72
3.2.3	Les méthodes hybrides	75
3.3	Résultats expérimentaux sur données synthétiques	76
3.3.1	Construction des données synthétiques réalistes	76
3.3.2	Mesures de performances	78
3.3.3	Performances des méthodes	81
3.3.4	Comparaisons et discussion des résultats	98
3.4	Résultats expérimentaux sur données réelles	101
3.4.1	SpaceCORR	102
3.4.2	MC-NMF	104
3.4.3	Méthodes hybrides	105
3.4.4	Bilan de l’étude du cas réel	106
	Conclusion	109
Chapitre 4 – Méthode géométrique à pixels purs et somme d’abondance non contrainte		111
	Introduction	113
4.1	Propriétés géométriques	114
4.1.1	Cône simplicial	114
4.1.2	Critère de séparation	116
4.2	La méthode MASS	118
4.2.1	Estimation de la matrice de mélange	118
4.2.2	Reconstruction des sources	120
4.3	Méthodes hybrides	120
4.4	Résultats expérimentaux sur données synthétiques	121

4.4.1	MASS	122
4.4.2	MASS-NMF-Spec	125
4.4.3	MASS-NMF-Map	129
4.4.4	Comparaisons et discussion des résultats	132
4.5	Résultats expérimentaux sur données réelles	136
4.5.1	MC-NMF	137
4.5.2	MASS	138
4.5.3	Méthodes hybrides	140
4.5.4	Bilan pour les données réelles	141
	Conclusion	144
Chapitre 5 – Méthode de SAS basée sur l’intersection de sous-espaces		145
	Introduction	146
5.1	Contexte géométrique	148
5.2	La méthode SIBIS	149
5.2.1	Identification des paires de zones IMS	150
5.2.2	Estimation de la matrice de mélange	151
5.2.3	Reconstruction des sources	152
5.3	Résultats expérimentaux	153
5.3.1	Tests sur données synthétiques	153
5.3.2	Test sur données réelles	155
	Conclusion	155
Conclusion générale et perspectives		159
Bibliographie		172

Abréviations

ALS	Alternating Least Square
BiSCorr	Bi-Source Correlation
CCA	Convex Cone Analysis
CMB	Cosmic Microwave Background
DUET	Degenerate Unmixing Estimation Technique
GMCA	Generalized Morphological Component Analysis
HIFI	Heterodyne Instrument for the Far-Infrared
ICA	Independent Component Analysis
i.i.d.	indépendant et identiquement distribué
IR	InfraRouge
IRS	Infrared Spectrograph
JADE	Joint Approximate Diagonalization of Eigen-matrices
MASS	Maximum Angle Source Separation
MASS-NMF-Spec	MASS-MC-NMF avec initialisation spectrale
MASS-NMF-Map	MASS-MC-NMF avec initialisation spatiale
MC	Monte Carlo
MCMC	Markov Chain Monte Carlo
MC-NMF	Monte-Carlo - Nonnegative Matrix Factorization
MVC-NMF	Minimum Volume Constrained Nonnegative Matrix Factorization
MVES	Minimum Volume Enclosing Simplex
MVSA	Minimum Volume Simplex Analysis
NMCEB	Normalized Monte Carlo Error Bar
NMF	Nonnegative Matrix Factorization
NNLS	NonNegative Least Square
NRMSE	Normalized Root Mean Square Error
OSP	Orthogonal Subspace Projection
PAH	Polycyclic Aromatic Hydrocarbons
PCA	Principal Component Analysis
PDF	Probability Density Function
PDR	Photo-Dissociation Regions
PMF	Positive Matrix Factorisation
PPI	Pixel Purity Index
PSF	Point Spread Function

QNS	Quasi Non-Sparse
SAM	Spectral Angle Mapper
SAS	Séparation Aveugle de Sources
SCA	Sparse Component Analysis
SCA-NMF-Spec	SpaceCORR-MC-NMF avec initialisation spectrale
SCA-NMF-Map	SpaceCORR-MC-NMF avec initialisation spatiale
SCSA	Simplicial Cone Shrinking Algorithm
SISAL	Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian
SIBIS	Subspace Intersection Blind Identification and Separation
SMACC	Sequential Maximum Angle Convex Cone
SMICA	Spectral Matching Independent Component Analysis
SNR	Signal to Noise Ratio
SOBI	Second Order Blind Identification
SpaceCORR	Spatial CORRelation
SVD	Singular Value Decomposition
TempCORR	Temporal CORRelation
TempROM	Temporal Ratios Of Mixtures
TiFCORR	Time-Frequency CORRelation
TiFROM	Time-Frequency Ratios Of Mixtures
TiSCORR	Time-Scale Ratios Of Mixtures
UV	UltraViolet
VCA	Vertex Component Analysis
VSG	Very Small Grains
WDO	W-Disjoint-Orthogonality

Introduction générale

1 Contexte et objectifs

Les régions de notre galaxie situées entre les étoiles sont regroupées sous l'appellation de “milieu interstellaire”. Bien que ce milieu soit généralement très dilué, on y trouve de la matière injectée par les étoiles en fin de vie. Cette matière n'est pas répartie uniformément dans le milieu interstellaire mais concentrée dans des nuages de gaz et de poussière. Ces nuages présentent la particularité d'absorber la lumière émise par les étoiles dans l'ultraviolet (UV) pour en réémettre la majeure partie dans l'infrarouge (IR).

Plus spécifiquement, certaines portions des nuages interstellaires sont baignées par un flux de rayonnement UV suffisamment intense pour dissocier les molécules. Ces zones d'interaction entre rayonnement et matière sont appelées régions de photodissociation (PDR pour *Photo-Dissociation Regions* en anglais). Ce type d'interface a un impact majeur sur la structure, la dynamique, la chimie et l'équilibre thermique du nuage.

On s'intéresse ici aux régions de formations stellaires, caractérisées par la présence de jeunes étoiles massives entourées d'un nuage de matière où l'interaction entre le gaz, la poussière et les photons UV est particulièrement importante. L'étude de ces PDR permet de comprendre l'influence d'une étoile massive sur son voisinage, qui peut favoriser l'effondrement gravitationnel du nuage de matière, entraînant la formation de nouvelles étoiles.

L'imagerie hyperspectrale dans le domaine IR est l'outil privilégié pour l'étude de ces régions. Elle donne accès aux principales raies de refroidissement du gaz et à l'émission de la poussière, à partir desquelles il est possible de déterminer les conditions physiques locales en s'appuyant sur les modèles de transfert de rayonnement ou de régions photodominées.

Une image hyperspectrale (ou cube hyperspectral) est une fonction de trois variables, à savoir deux variables de position (position d'un pixel dans une image) et une variable spectrale (longueur d'onde). Ainsi, à chaque pixel de l'image correspond un spectre d'intensité électromagnétique.

Dans le contexte d'étude des PDR, les images hyperspectrales acquises par les télescopes spatiaux (*e.g.* Spitzer et Herschel) présentent une caractéristique majeure. Tout d'abord le milieu observé est, au premier ordre, “transparent” aux longueurs d'onde considérées. Le spectre mesuré pour chaque pixel correspond donc à l'émission sur toute la profondeur du nuage de matière. Ensuite, sous l'effet du rayonnement UV intense, le nuage de matière est structuré en strates. Chaque couche du nuage est constituée de molécules de gaz et de poussières spécifiques, et possède donc une signature spectrale propre que l'on appellera composante élémentaire.

Le spectre global obtenu pour un pixel donné est alors une combinaison (linéaire instantanée dans notre cas) des spectres élémentaires émis par les différentes couches du nuage de matière.

L'étude des structures de la PDR passe donc par l'extraction d'une part des spectres élémentaires associés à chaque couche du nuage de matière observé et d'autre part des cartes de répartition donnant la disposition des différentes couches du nuage dans la nébuleuse. Pour réaliser cette décomposition mathématique du cube spectral, on utilise des méthodes de séparation aveugle de sources (SAS). Les problèmes de SAS consistent à estimer un ensemble de signaux sources inconnus à partir d'un ensemble de signaux observés qui sont des mélanges de ces signaux sources, l'opérateur de mélange étant en partie inconnu. Dans notre contexte, on modélise le mélange par une combinaison linéaire instantanée, cependant les paramètres du mélange (*i.e.* les coefficients donnant la contribution de chaque source dans chaque observation) sont inconnus et sont aussi à estimer.

L'objectif de ces travaux de thèse est le développement de méthodes de SAS dédiées à l'analyse des données hyperspectrales et répondant aux contraintes imposées par les observations de régions de photodissociation. Dans ce but, nous avons étudié dans un premier temps les possibilités qu'offrent les méthodes de SAS présentes dans la littérature et applicable à notre contexte spécifique. Après avoir souligné les avantages et inconvénients des méthodes existantes et utilisables, nous avons développé des méthodes de SAS originales permettant une décomposition des images hyperspectrales sous les contraintes imposées par le contexte astrophysique.

2 Organisation du manuscrit

Nous commencerons cette étude par deux chapitres portant sur l'état de l'art. Dans le premier chapitre, nous présenterons le concept de la SAS dans un contexte général. Nous décrirons les différents types de mélanges rencontrés dans les principaux domaines d'application, puis nous présenterons les différentes classes de méthodes de la littérature permettant de résoudre le problème de SAS pour un modèle linéaire instantané. Nous nous focaliserons davantage sur les méthodes utilisables dans notre contexte.

Dans le second chapitre, nous aborderons la problématique de SAS que soulève l'imagerie hyperspectrale en observation de la Terre et en astrophysique. Ensuite, nous établirons un panorama des méthodes de SAS spécifiques à ces deux domaines d'application. Pour finir, nous décrirons les données sur lesquelles nous travaillerons tout au long de ce manuscrit et conclurons ainsi sur nos choix méthodologiques.

Les trois chapitres suivants présentent nos contributions en termes de méthodes de SAS. Le chapitre trois porte sur l'hybridation d'une méthode d'analyse en composantes parcimonieuses, appelée SpaceCORR, avec une méthode de factorisation en matrices non négatives (NMF). L'objectif de cette approche est d'exploiter les avantages des méthodes SpaceCORR et NMF tout en contrebalançant leurs inconvénients respectifs.

Dans le chapitre quatre, nous proposerons une première approche permettant de relâcher

la contrainte de parcimonie imposée par SpaceCORR. La méthode développée, appelée MASS, est basée sur l'exploitation de la structure géométrique que prennent les données sous certaines conditions de parcimonie. Nous étudierons également l'hybridation de MASS avec la NMF.

Dans le chapitre cinq, nous proposons une seconde approche permettant de relâcher la contrainte de parcimonie imposée par SpaceCORR. La méthode développée, appelée SIBIS, est une méthode géométrique basée sur l'étude de l'intersection des sous-espace engendrés par certaines régions de l'image hyperspectrale présentant des propriétés de parcimonie.

Pour chacun des chapitres détaillant nos contributions méthodologiques, un ensemble de tests sur données simulées est réalisé afin d'étudier les performances et les limites de nos approches. Chaque méthode est enfin appliquée sur les données réelles à notre disposition.

Pour finir, nous proposons dans un dernier chapitre une conclusion générale à ces travaux ainsi qu'un ensemble de perspectives.

Chapitre 1

La Séparation Aveugle de Sources

Sommaire

Introduction	7
1.1 Généralités	7
1.2 Modèles de mélange	8
1.2.1 Mélanges Linéaires	8
1.2.1.1 Mélange linéaire instantané	8
1.2.1.2 Mélange linéaire à retard	9
1.2.1.3 Mélange convolutif	9
1.2.2 Mélanges non linéaires	9
1.2.2.1 Mélange post non linéaire	9
1.2.2.2 Mélange linéaire quadratique	10
1.3 Paramètres complémentaires	10
1.3.1 Estimation du nombre de sources	10
1.3.2 Indéterminations	12
1.4 Méthodes pour les mélanges linéaires instantanés	13
1.4.1 Analyse en Composantes Indépendantes	15
1.4.1.1 Méthodes basées sur la non gaussianité	15
1.4.1.2 Méthodes basées sur la structure des signaux	16
1.4.2 Factorisation en matrices non négatives	16
1.4.2.1 Principe général	17
1.4.2.2 Algorithmes standard de NMF	18
1.4.2.3 Unicité et convergence	20
1.4.3 Analyse en composantes parcimonieuses	23
1.4.3.1 Parcimonie conjointe	25
1.4.3.2 Espace de représentation	25
1.4.3.3 Catégories de méthodes de SCA	27
1.4.3.4 Principe général des méthodes QNS	29
1.4.3.5 SpaceCORR	33
1.4.4 Inférence bayésienne	34

1.4.5	Méthodes géométriques	35
1.4.5.1	Principe général	35
1.4.5.2	Méthodes d'identification par les sommets	36
1.4.5.3	Méthodes d'identification par les facettes	38
Conclusion		39

Introduction

Dans ce chapitre, nous introduirons le concept de la Séparation Aveugle de Sources (SAS) dans un contexte général. Nous décrirons les différents types de mélanges rencontrés dans les principaux domaines d'application, puis nous présenterons les différentes classes de méthodes de la littérature permettant de résoudre le problème de SAS pour un modèle linéaire instantané. Nous nous focaliserons davantage sur les méthodes basées sur la factorisation en matrices non-négatives, l'analyse en composantes parcimonieuses ainsi que sur les méthodes géométriques, ces classes de méthodes nous servant de base afin de traiter notre problématique.

1.1 Généralités

La séparation aveugle de sources est un problème générique de traitement de données rencontré dans de nombreux domaines d'application. L'étude de phénomènes physiques, ou la caractérisation d'un milieu, passe généralement par la mesure de signaux d'intérêt nous renseignant sur les phénomènes ou le milieu considéré. Dans certains cas, les signaux d'intérêt que l'on souhaite étudier sont mélangés lors de leur propagation simultanée jusqu'aux capteurs et sont éventuellement bruités. Le terme signal ici est à prendre au sens large puisqu'il dépend de la nature du phénomène observé : acoustique, spectroscopique, images ou encore d'autre type de données plus complexes. Ainsi, un capteur (un microphone, une antenne, un imageur...) fournit des données constituant un signal observé issu du mélange des signaux d'intérêt, appelés signaux sources.

Parmi les domaines d'application de la SAS, on mentionnera par exemple l'étude des signaux acoustiques [1, 50, 95, 121, 140], les télécommunications [47, 128], le biomédical [42, 77, 87, 91, 134, 141], l'observation de la Terre [80] ou encore l'astrophysique [16, 27, 113]. Ces deux dernières applications, et en particulier la télédétection en astrophysique, seront détaillées dans la suite de ce manuscrit. Pour un panorama plus complet des méthodes de SAS générales et des applications, le lecteur pourra consulter [33, 37, 38, 39, 44, 46, 71]. La grande variété de champs d'application de la SAS conduit à l'élaboration de plusieurs modèles de mélange de données.

Pour illustrer la procédure de mélange, on prend l'exemple d'un ensemble de M observations notées x_m ($m \in \{1, \dots, M\}$) issues du mélange de L sources notées s_ℓ ($\ell \in \{1, \dots, L\}$). Chaque signal source et signal observé est constitué de N échantillons que l'on indicera par n . Suivant le domaine d'application, n peut désigner un indice temporel, fréquentiel, spatial... La Figure 1.1 illustre le mélange des sources s_ℓ par un système de mélange \mathcal{M} .

La relation entre les sources et les observations est donnée par l'application :

$$x_m = \mathcal{M}(s_1, s_2, \dots, s_L). \quad (1.1)$$

L'objectif de la SAS est d'estimer l'ensemble des signaux sources s_ℓ uniquement à partir des signaux observés x_m . L'opérateur de mélange \mathcal{M} est en partie inconnu. La classe de l'opérateur est prédéfinie et dépend du modèle de mélange mais les paramètres de cet opérateur sont inconnus et sont donc aussi à estimer. C'est pourquoi on parle de méthodes

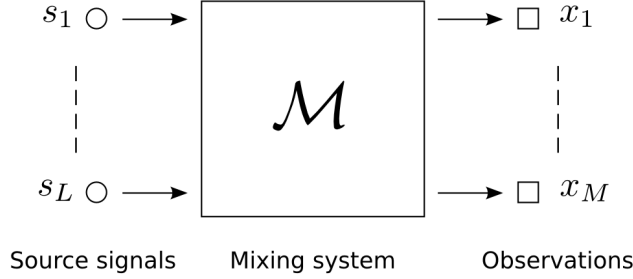


FIGURE 1.1 – Procédure de mélange

aveugles de séparation.

En plus de la classe de l'opérateur de mélange, d'autres paramètres sont à prendre en compte pour résoudre la problème de SAS comme l'estimation du nombre de sources, le nombre d'observations par rapport au nombre de sources ainsi que des indéterminations de permutation et d'échelle. Ces différents points sont détaillés dans les paragraphes suivants.

1.2 Modèles de mélange

Le modèle de mélange caractérise le système liant les sources aux observations. Il peut être linéaire (instantané ou convolutif), ou non linéaire. Les données astrophysiques sur lesquelles nous travaillons sont issues de mélanges linéaires instantanés (ce point sera détaillé dans la Section 2.2.2). C'est pourquoi nous ne présentons ici qu'un simple panorama des modèles existants sans en détailler la nature ni les applications.

1.2.1 Mélanges Linéaires

Les mélanges linéaires appartiennent à la première catégorie de type de mélange. Ils sont largement répandus dans la littérature et comportent trois sous catégories.

1.2.1.1 Mélange linéaire instantané

Dans ce modèle, chaque observation est une combinaison linéaire des sources. On parle de mélange instantané lorsque la valeur du $n^{ième}$ échantillon de l'observation dépend uniquement de la combinaison linéaire des valeurs des sources au même $n^{ième}$ échantillon :

$$x_m(n) = \sum_{\ell=1}^L a_{m\ell} s_{\ell}(n), \quad (1.2)$$

où $a_{m\ell}$ sont les coefficients de mélange donnant la contribution de la source ℓ dans l'observation m . Ce modèle peut être écrit sous la forme matricielle suivante :

$$X = AS, \quad (1.3)$$

où $X \in \mathbb{R}^{M \times N}$ est la matrice des observations, $A \in \mathbb{R}^{M \times L}$ la matrice de mélange et $S \in \mathbb{R}^{L \times N}$ la matrice des sources.

1.2.1.2 Mélange linéaire à retard

Ce modèle de mélange linéaire est une généralisation du modèle précédent. Dans ce cas, la valeur du $n^{i\text{ème}}$ échantillon de l'observation est une combinaison linéaire des valeurs des sources à un indice différent :

$$x_m(n) = \sum_{\ell=1}^L a_{m\ell} s_{\ell}(n - n_{m\ell}), \quad (1.4)$$

où $n_{m\ell}$ correspond au décalage de la source ℓ dans l'observation m . Par exemple, dans le cas de signaux temporels, ce décalage peut être introduit lorsque le temps de propagation des sources jusqu'aux capteurs est différent pour chaque source.

1.2.1.3 Mélange convolutif

Dans ce modèle, chaque observation est une combinaison linéaire des sources convoluées par un filtre propre à chaque source et à chaque observation :

$$x_m(n) = \sum_{\ell=1}^L f_{m\ell} * s_{\ell}(n), \quad (1.5)$$

où $f_{m\ell}$ est la réponse impulsionnelle du filtre relatif à la source ℓ dans l'observation m . Par exemple, dans le cas de signaux temporels, ce modèle est utilisé en présence de réflexions (un capteur reçoit plusieurs fois la même source avec des décalages différents).

1.2.2 Mélanges non linéaires

La seconde catégorie de mélange concerne les mélanges non linéaires. Ces modèles, moins répandus dans la littérature, se rapportent à des applications pour lesquelles le modèle linéaire est insuffisant pour décrire le mélange des signaux d'intérêt. On distinguera les deux modèles suivants :

1.2.2.1 Mélange post non linéaire

Ce modèle de mélange est caractérisé par l'ajout d'une transformation non linéaire f_m à un modèle linéaire instantané, chaque observation pouvant subir une transformation non linéaire différente :

$$x_m(n) = f_m \left(\sum_{\ell=1}^L a_{m\ell} s_{\ell}(n) \right). \quad (1.6)$$

1.2.2.2 Mélange linéaire quadratique

Ce modèle de mélange est caractérisé par l'ajout d'interactions possibles entre les sources elle-mêmes. L'interaction entre deux sources est modélisée par le produit des valeurs des échantillons de ces sources :

$$x_m(n) = \sum_{\ell=1}^L a_{m\ell} s_{\ell}(n) + \sum_{1 \leq i \leq j \leq L} b_{mij} s_i(n) s_j(n). \quad (1.7)$$

Pour plus de détails sur les mélanges non linéaires, le lecteur peut se référer à [30, 46, 49, 66, 67, 84, 100, 130].

1.3 Paramètres complémentaires

1.3.1 Estimation du nombre de sources

Un problème inhérent à la SAS est l'estimation du nombre L de sources présentes dans les observations. Dans la majorité des cas, ce paramètre doit être fixé avant de procéder à la séparation des sources proprement dite. On notera que certaines méthodes (par exemple celle explicitée dans la Section 1.4.3.4) peuvent estimer le nombre de sources parallèlement à la séparation. L'approche classique pour estimer le nombre de sources que nous allons détailler est basée sur la décomposition en éléments propres de la matrice de covariance des données (procédé similaire à l'Analyse en Composantes Principales (PCA pour *Principal Component Analysis* en anglais) [131]. Le principe de la méthode est disponible dans [97]. Notons qu'il existe d'autres méthodes pour estimer le nombre de sources d'un mélange mais elles nécessitent des contraintes supplémentaires sur le modèle de mélange linéaire. On retrouve cette configuration en imagerie hyperspectrale pour l'observation de la Terre (voir par exemple [18]).

La méthode consiste à chercher le nombre minimum de composantes qui contribuent le plus dans la variance totale des données, en supposant que le bruit est indépendant et identiquement distribué (i.i.d.). Ce nombre correspond au nombre de sources présentes dans les observations. Notons Σ_X la matrice de covariance empirique des observations X :

$$\Sigma_X = \frac{1}{N} X_c X_c^T, \quad (1.8)$$

où X_c est la matrice des données centrées : $X_c(m, \cdot) = X(m, \cdot) - \bar{X}(m, \cdot)$. La décomposition de Σ_X en éléments propres s'écrit :

$$\Sigma_X = \sum_{i=1}^M \lambda_i e_i e_i^T, \quad (1.9)$$

où λ_i est la $i^{\text{ème}}$ valeur propre associée au vecteur propre e_i . Les valeurs propres de Σ_X ont alors les propriétés suivantes (une preuve de ces propriétés est disponible dans [51]).

Propriété 1 : Pour des données non bruitées (on note X_0 la matrice des observations non bruitées), la matrice de covariance Σ_{X_0} possède L valeurs propres positives et $M - L$ valeurs propres nulles.

Le nombre L de sources est alors directement déduit de cette propriété. Pour une application réelle, les données sont généralement perturbées par un bruit que l'on ne peut pas négliger. Supposons donc que les observations X sont perturbées par un bruit E , blanc suivant les indices m et n , additif, centré et de variance σ_E^2 . On a alors $X = X_0 + E$. La relation entre la matrice de covariance des observations non bruitées Σ_{X_0} et la matrice de covariance des observations bruitées Σ_X est donné par :

$$\Sigma_X = \Sigma_{X_0} + \sigma_E^2 I_M, \quad (1.10)$$

où I_M est la matrice identité ($M \times M$).

Propriété 2 : Les valeurs propres λ de Σ_X et les valeurs propres λ_0 de Σ_{X_0} sont liées par la relation :

$$\lambda = \lambda_0 + \sigma_E^2. \quad (1.11)$$

Ces deux propriétés permettent alors de déduire que les valeurs propres ordonnées $\lambda_{(i)}$ de Σ_X pour un mélange de L sources sont telles que :

$$\lambda_{(1)} \geq \dots \geq \lambda_{(L)} > \lambda_{(L+1)} = \dots = \lambda_{(M)} = \sigma_E^2. \quad (1.12)$$

En pratique, à cause du nombre limité d'échantillons et de l'hypothèse forte d'un bruit blanc ayant la même variance pour toutes les observations, l'égalité $\lambda_{(L+1)} = \dots = \lambda_{(M)} = \sigma_E^2$ n'est pas vérifiée. Cependant, la différence entre les valeurs propres $\lambda_{(L+1)}, \dots, \lambda_{(M)}$ est faible comparée à la différence entre les valeurs propres $\lambda_{(1)}, \dots, \lambda_{(L)}$ (en particulier entre les valeurs propres $\lambda_{(L)}$ et $\lambda_{(L+1)}$). La courbe des valeurs propres ordonnées est donc constituée de deux parties. La première partie Ω_S contient les L premières valeurs propres associées aux composantes ayant une forte contribution dans la variance totale des données. Dans cette partie de la courbe, les valeurs propres sont significativement différentes. La seconde partie Ω_E contient les valeurs propres restantes associées au bruit. Dans cette partie, les valeurs propres sont similaires. Un exemple de courbe est donné sur la Figure 1.2.

Le but de la méthode d'estimation du nombre de sources est d'identifier à partir de quel indice $r = L+1$ les valeurs propres ne varient plus significativement. Cette étape de la procédure peut être réalisée par un algorithme automatique introduit dans [97]. Cette méthode basée sur le gradient de la courbe des valeurs propres permet d'identifier une cassure dans cette courbe.

Par ailleurs, selon la valeur L du nombre de sources par rapport au nombre des observations M présentes dans les données, on peut distinguer trois situations indépendamment du modèle de mélange :

- Si le nombre d'observations est égal au nombre de sources ($M = L$), on parle de mélange déterminé.
- Si le nombre d'observations est supérieur au nombre de sources ($M > L$), on parle de mélange sur-déterminé.

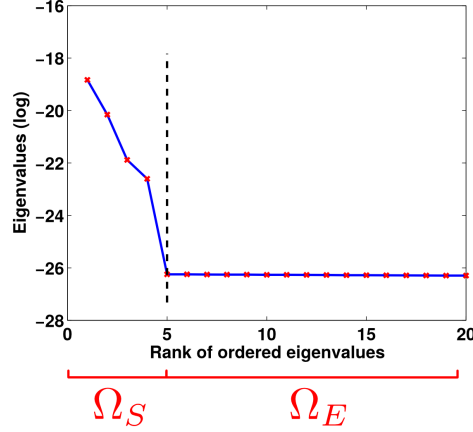


FIGURE 1.2 – Exemple de courbe des valeurs propres ordonnées pour un mélange synthétique de 4 sources en présence d’un bruit blanc suivant les indices m et n .

- Si le nombre d’observations est inférieur au nombre de sources ($M < L$), on parle de mélange sous-déterminé.

Les mélanges déterminés et sur-déterminés sont en général équivalents en terme de traitement par des méthodes de SAS, les mélanges sur-déterminés étant souvent plus avantageux notamment en terme de robustesse au bruit. Cependant des subtilités peuvent apparaître comme nous le verrons dans le Chapitre 5 où la méthode que nous proposons nécessite un nombre minimale d’observations supérieur au nombre de sources (au moins $2L$ observations dans le meilleur cas). Il est parfois nécessaire de ramener un mélange sur-déterminé à un mélange déterminé en utilisant des méthodes de réduction de dimensions telle que l’analyse en composantes principales (PCA) [131]. Par exemple, ce cas peut apparaître lorsque la méthode de séparation nécessite le calcul de déterminant de la matrice de mélange A (par exemple la méthode N-FINDR [139] décrite dans la Section 2.4.2). Le cas des mélanges sous-déterminés est plus difficile à résoudre et nécessite l’ajout de contraintes supplémentaires ou d’utiliser des méthodes spécifiques.

1.3.2 Indéterminations

A partir du modèle de mélange linéaire instantané, on peut mettre en évidence deux incertitudes de la SAS. En effet, sans information *a priori* sur les signaux sources mélangés, l’échange d’un facteur quelconque entre une source et son coefficient de mélange n’affecte en rien les observations :

$$x_m(n) = \sum_{\ell=1}^L a_{m\ell} s_{\ell}(n) \quad (1.13)$$

$$= \sum_{\ell=1}^L \frac{a_{m\ell}}{b_{\ell}} b_{\ell} s_{\ell}(n). \quad (1.14)$$

Cette incertitude est appelée indétermination d'échelle sur les signaux sources. Afin de pallier cette indétermination, une normalisation des sources ou des coefficients de mélanges est possible (par exemple fixer la norme ℓ_2 de chaque source à l'unité, ou fixer les éléments diagonaux de la matrice de mélange à l'unité). Ces solutions sont en général des conventions et n'ont aucune incidence sur la forme du signal source estimé. On notera cependant que ces normalisations ont parfois un sens lorsque l'on peut exprimer les signaux ou les coefficients de mélange dans une unité de mesure physique.

Par ailleurs, l'indice ℓ associé à chaque source est arbitraire car les sources sont estimées à une permutation près des vraies sources. En effet, si on change l'ordre des sources et des coefficients de mélanges associés dans l'équation (1.13), l'observation n'est pas modifiée. Cette permutation est appelée indétermination d'ordre. Notons que cette indétermination doit être prise en compte dans le cas de résultats issus de données synthétiques permettant d'évaluer les performances d'une méthode, les mesures d'erreurs d'estimations étant affectées par les permutations des sources.

1.4 Méthodes pour les mélanges linéaires instantanés

La SAS est la discipline regroupant les méthodes permettant d'estimer les L signaux sources s_ℓ (et leurs coefficients de mélange associés $a_{m\ell}$) à partir de leurs mélanges contenus dans les M signaux observés x_m . Comme mentionné précédemment, notre champ d'investigation concerne la SAS pour des données issues d'un mélange linéaire instantané. Dans cette section, on s'intéresse donc aux méthodes les plus répandues dans la littérature en rapport avec le mélange linéaire instantané :

$$x_m(n) = \sum_{\ell=1}^L a_{m\ell} s_\ell(n), \quad (1.15)$$

écrit sous forme matricielle :

$$X = AS, \quad (1.16)$$

avec X ($M \times N$) la matrice des observations, A ($M \times L$) la matrice de mélange et S ($L \times N$) la matrice des sources. L'objectif de la SAS est donc d'obtenir une estimation des deux matrices inconnues A et S aux indéterminations près. On note \hat{A} et \hat{S} les estimations respectives de A et S :

$$X \approx \hat{A}\hat{S}. \quad (1.17)$$

La procédure générale de la SAS est illustrée sur la Figure 1.3.

Le problème de la SAS est un problème mal-posé, et ce indépendamment du modèle de mélange. Si on ne dispose pas d'information supplémentaire sur le mélange et/ou les sources, l'équation (1.17) possède une infinité de solutions. En effet si le couple $\{\hat{A}, \hat{S}\}$ est une solution, alors $\{\hat{A}P^{-1}, P\hat{S}\}$ est aussi une solution pour toute matrice P inversible. Pour résoudre le problème de nombre infini de solutions, il est nécessaire d'ajouter des contraintes sur les coefficients de mélanges et/ou sur les sources afin de parvenir à une solution unique, ou tout au moins afin de réduire le nombre de solutions admissibles. Selon le domaine d'application, on

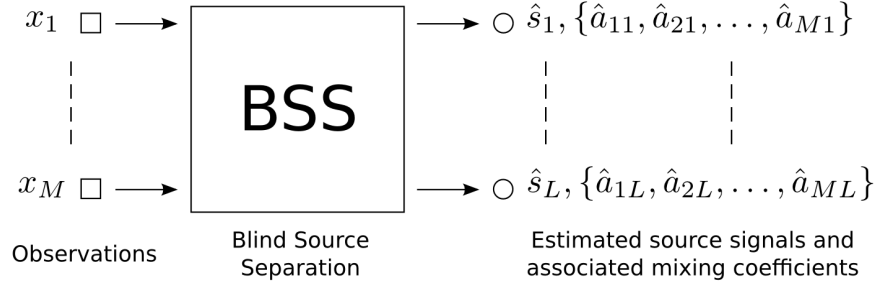


FIGURE 1.3 – Procédure de séparation

dispose d'informations *a priori* sur les données permettant d'imposer des contraintes comme par exemple l'indépendance statistique, la non-négativité, la parcimonie, etc... La nature des contraintes que l'on impose définit les différentes classes de méthodes de la SAS.

Historiquement, les premiers travaux portant sur la SAS sont attribués à J. Héroult, C. Jutten et B. Ans dans les années 80 [72]. Depuis, plusieurs grandes classes de méthodes ont émergé et sont abondamment étudiées dans la littérature.

La première classe concerne les méthodes d'Analyse en Composantes Indépendantes (ICA pour *Independent Component Analysis* en anglais). Elles sont basées sur un formalisme probabiliste et requièrent que les signaux sources soient mutuellement statistiquement indépendants. Jusqu'au début des années 2000, l'ICA était la seule classe de méthodes permettant de réaliser la SAS. Pour plus de détails sur cette classe de méthodes, le lecteur pourra consulter [37, 44, 46, 71].

La seconde classe de méthodes concerne les méthodes de Factorisation en Matrices Non-négatives (NMF pour *Nonnegative Matrix Factorisation* en anglais). Ces méthodes apparues au début des années 2000 requièrent que les sources et les coefficients de mélange soient non négatifs. Pour plus de détails sur cette classe de méthodes, le lecteur pourra consulter [33, 89, 90].

La troisième classe de méthodes concerne les méthodes d'Analyse en Composantes Parcimonieuses (SCA pour *Sparse Component Analysis* en anglais). Ces méthodes requièrent que les signaux sources soient parcimonieux dans un domaine de représentation (temporel, spatial, temps-fréquence ou temps-échelle par exemple). Pour plus de détails sur cette classe de méthodes, le lecteur pourra consulter [37, 45, 46, 63].

La dernière classe de méthodes concerne les méthodes basées sur l'inférence bayésienne. Ces méthodes permettent d'ajouter de l'information *a priori* en attribuant des densités de probabilité aux sources et aux coefficients de mélange. Pour plus de détails sur cette classe de méthodes, le lecteur pourra consulter le Chapitre 12 de [37].

Parmi les méthodes de SAS existantes, une autre classe de méthodes couramment utilisées est à évoquer : les méthodes basées sur une représentation géométrique des données [19]. Ces méthodes géométriques sont généralement incluses dans les méthodes SCA puisqu'elles requièrent des hypothèses plus ou moins restrictives de parcimonie. La plupart des méthodes géométriques étant développées pour des applications en télédétection, elles requièrent l'ajout de contraintes supplémentaires au modèle linéaire usuel Eq. (1.16). Nous présenterons donc

cette classe de méthodes en deux temps. Dans ce chapitre, nous détaillerons les méthodes géométriques applicables au modèle linéaire standard, puis dans le Chapitre 2 dédié à l'imagerie hyperspectrale nous présenterons un panorama des méthodes géométriques nécessitant un modèle linéaire contraint.

1.4.1 Analyse en Composantes Indépendantes

Les premières méthodes de SAS ont été des méthodes basées sur l'ICA [37, 46, 71]. Cette classe de méthodes peut être vue comme un prolongement de l'analyse en composantes principales (PCA) [131], dans laquelle le critère de non corrélation des sorties est remplacé par l'indépendance statistique. Comme nous le verrons dans la Section 2.6.2, nous nous intéressons à des données astrophysiques pour lesquelles les sources sont spatialement et spectralement corrélées (voir Section 2.6.2.1 pour plus de détails). Ainsi cette classe de méthodes ne pourra pas être utilisée dans notre contexte. Néanmoins, l'ICA étant l'une des classes de méthodes les plus utilisées en SAS, nous en présentons ici le principe général.

Dans l'ICA, les sources sont modélisées par des variables aléatoires, ainsi $s_\ell(n)$ est la $n^{\text{ième}}$ réalisation de la variable aléatoire s_ℓ . L'objectif de l'ICA est d'estimer les sources de telle sorte que celles-ci soient mutuellement statistiquement indépendantes. Cependant, cette hypothèse sur les propriétés des sources n'est pas suffisante pour garantir la séparation des sources. En effet, il a été démontré dans [36] que séparer des signaux indépendants et identiquement distribués (i.i.d) suivant une loi gaussienne est impossible. La résolution du problème de SAS passe par l'ajout d'une des deux hypothèses complémentaires suivantes : soit les sources suivent une loi de probabilité non gaussienne (sauf au plus une), soit les sources sont non i.i.d. On aboutit donc à deux catégories de méthodes ICA basées sur l'une ou l'autre de ces hypothèses complémentaires.

1.4.1.1 Méthodes basées sur la non gaussianité

Cette première catégorie comprend les méthodes applicables aux sources i.i.d. avec la nécessité que les sources soient non gaussiennes (sauf au plus une). En pratique, l'estimation des sources est réalisée par l'optimisation d'un critère d'indépendance statistique. Nous présentons ci-dessous les principaux critères utilisés par l'ICA pour cette première catégorie :

Maximisation de la non gaussianité Le principe de ce critère est de forcer les sources estimées à être le plus non gaussiennes possible. La mesure la plus utilisée pour la non gaussianité est le kurtosis normalisé. Il vaut zéro pour une distribution gaussienne. Plus la valeur absolue du kurtosis normalisé d'une distribution augmente, plus la densité de cette dernière s'éloigne de la densité gaussienne. Une autre mesure de la non gaussianité est basée sur la théorie de l'information : la néguentropie. Elle est toujours positive ou nulle, et vaut zéro uniquement pour une distribution gaussienne. L'une des méthodes les plus connues basée sur la maximisation de la non gaussianité est FastICA [70].

Minimisation de l'information mutuelle Ce critère est déduit de la théorie de l'information. L'information mutuelle est une mesure permettant de caractériser directement l'indépendance statistique entre des variables aléatoires. Elle est toujours positive et s'annule

si et seulement si les variables aléatoires sont statistiquement indépendantes. Elle donne donc une mesure directe de l'indépendance statistique des sources. On peut citer comme exemple d'utilisation de ce critère les travaux [5, 36, 37, 118].

Maximisation de la vraisemblance Ce critère permet d'estimer les sources et les coefficients de mélange qui maximisent la vraisemblance des observations. En pratique les densités de probabilité des sources sont inconnues, elles sont alors supposées comme appartenant à une famille de distributions donnée. Le critère de maximisation de la vraisemblance a été notamment étudié dans [9, 59, 120].

Approche tensorielle Cette approche est basée sur l'utilisation des cumulants d'ordre supérieur (en général d'ordre 4) comme critère d'indépendance statistique. Les cumulants croisés d'ordre 4 de variables aléatoires forment un opérateur multilinéaire appelé tenseur de cumulants d'ordre 4. Une propriété du tenseur de cumulants d'ordre 4 est qu'il est diagonal pour des variables aléatoires mutuellement indépendantes. Les sources sont alors estimées par diagonalisation du tenseur relatif aux signaux de sortie du système de séparation. C'est sur ce principe qu'est fondée la méthode JADE [26].

1.4.1.2 Méthodes basées sur la structure des signaux

Cette seconde catégorie comprend les méthodes applicables aux sources gaussiennes avec la nécessité que les sources soient non i.i.d. Parmi ces méthodes, on distingue celles basées sur l'autocorrélation des sources et celles basées sur la non stationnarité des sources.

Lorsque les sources sont autocorrélées, la séparation est réalisée en imposant la nullité de l'intercorrélacion des sources pour différents décalages temporels. Cette approche est utilisée dans la méthode SOBI [8] et la méthode AMUSE [133].

Lorsque les sources sont non stationnaires, la séparation est réalisée par décorrélation des sources entre elles à différent instants. Nous citerons [119] comme exemple de travaux utilisant cette approche.

1.4.2 Factorisation en matrices non négatives

Les méthodes de NMF sont basées sur la décomposition d'une matrice non négative (*i.e.* dont les éléments sont positifs ou nuls) en un produit de deux matrices également non négatives. Ces méthodes ne se limitent pas au problème de SAS et peuvent être rencontrées dans d'autres applications, notamment en classification avec par exemple, la classification de texture, la reconnaissance faciale ou encore la surveillance d'email (Chapitre 8 de [33]). Nos travaux portant spécifiquement sur la SAS, nous nous restreindrons dans la suite de ce manuscrit au vocabulaire et aux notations introduits précédemment pour la décomposition du mélange linéaire instantané Eq. (1.16) pour décrire les méthodes de NMF.

La première méthode de factorisation a été introduite au milieu des années 90 par P. Paatero et U. Tapper [115, 116] sous la dénomination de PMF (pour *Positive Matrix Factorisation* en anglais). Bien que ces travaux initient l'approche originale d'utiliser la positivité comme contrainte pour estimer un produit matriciel, les méthodes NMF sont popularisées à

la fin des années 90 par les travaux de D.D. Lee et H.S. Seung [89, 90]. Ces travaux introduisent un algorithme très simple à mettre en œuvre et convergeant plus rapidement que la PMF. Depuis cette période, d’autres approches ont été proposées dans la littérature afin de résoudre le problème de la NMF.

1.4.2.1 Principe général

L’objectif de ces méthodes est de décomposer la matrice des observations non négatives $X \in \mathbb{R}_+^{M \times N}$ en un produit de deux matrices non négatives $A \in \mathbb{R}_+^{M \times L}$ et $S \in \mathbb{R}_+^{L \times N}$ à une erreur d’estimation près : $X \approx \hat{A}\hat{S}$. En terme de SAS, les matrices \hat{A} et \hat{S} sont respectivement, les estimations des coefficients de mélange et des sources aux indéterminations d’échelle et de permutation près. Dans le suite du manuscrit, on notera les matrices estimés \hat{A} et \hat{S} en omettant le “chapeau” (à quelques exceptions près), afin d’alléger les notations.

La factorisation est réalisée en deux étapes. La première étape consiste à définir une mesure pour quantifier la différence entre la matrice des observations X et le produit AS . Le choix de cette mesure (ou distance) dépend de la structures des données, de la nature du bruit et donc de l’application. On note $\mathcal{D}(X||AS)$ la distance entre X et AS . La distance la plus naturelle et la plus utilisée dans la littérature est la distance euclidienne définie par la norme de Frobenius :

$$\mathcal{D}(X||AS) = \frac{1}{2} \|X - AS\|_F^2. \quad (1.18)$$

Une autre distance fréquemment utilisée dans la littérature est la divergence généralisée de Kullback-Leibler :

$$\mathcal{D}(X||AS) = \sum_{m,n} X_{m,n} \ln \left(\frac{X_{m,n}}{[AS]_{m,n}} \right) - X_{m,n} + [AS]_{m,n}. \quad (1.19)$$

On trouve également dans la littérature de nombreux algorithmes de NMF basés sur d’autres mesures que celles introduites par D.D. Lee et H.S. Seung [89, 90] et définies par Eq. (1.18) et Eq. (1.19). On mentionnera par exemple les classes des alpha-divergences ou des beta-divergences. Une liste détaillée et une étude comparative des mesures couramment utilisées par la NMF sont données dans le Chapitre 2 de [33].

La seconde étape consiste à minimiser la mesure de distance entre X et AS définie précédemment. Il s’agit de trouver les matrices optimales \hat{A} et \hat{S} à valeurs non négatives qui minimisent la fonction de coût \mathcal{J} suivante :

$$\mathcal{J}(A, S) = \mathcal{D}(X||AS) \quad A \geq 0, S \geq 0. \quad (1.20)$$

Le problème d’optimisation se résume donc à :

$$(\hat{A}, \hat{S}) = \underset{A, S}{\operatorname{argmin}} \mathcal{J}(A, S) \quad \text{tq. } \hat{A} \geq 0, \hat{S} \geq 0. \quad (1.21)$$

Plusieurs approches sont possibles afin d’optimiser cette fonction de coût. On trouve notamment dans la littérature des algorithmes basés sur la méthode des moindres carrés

alternés (ALS pour Alternating Least Square en anglais) [116], la méthode du gradient projeté [32, 96, 142], la méthode Quasi-Newton (Chapitre 6 de [33]) ou encore les mises à jour multiplicatives [89]. Nous donnons dans le paragraphe suivant quelques exemples de ces méthodes. Bien que les approches pour optimiser la fonction de coût Eq. (1.20) soient assez variées selon les applications, le principe général de ces algorithmes reste le même. On peut résumer la structure de ces algorithmes comme suit :

1. Initialisation des matrices A et S .
2. Estimation itérative et alternée des matrices A et S selon les équations de mise à jour définies par la méthode (ALS, multiplicative...) et par la mesure de distance.
3. L'estimation s'achève lorsque la condition d'arrêt est satisfaite.

En général, les matrices A et S sont initialisées aléatoirement. Cependant, nous verrons par la suite que la solution donnée par la NMF est fortement dépendante de l'initialisation de l'algorithme. Il existe plusieurs alternatives possibles afin de rendre la NMF plus robuste aux conditions initiales (voir Section 1.4.2.3).

Concernant les conditions d'arrêt, plusieurs versions sont possibles afin de fixer la convergence de l'algorithme. On note $\mathcal{D}^{(k)}$ la valeur de la distance \mathcal{D} à l'itération k . Voici les critères d'arrêt les plus courants :

- L'algorithme a convergé à l'itération k si la distance $\mathcal{D}^{(k)}$ devient inférieure à un seuil ϵ :

$$\mathcal{D}^{(k)}(X||\hat{A}\hat{S}) \leq \epsilon. \quad (1.22)$$

- L'algorithme a convergé à l'itération k si la distance \mathcal{D} n'a pas varié (ou très peu) entre deux itérations successives de la minimisation :

$$\frac{\mathcal{D}^{(k)}(X||\hat{A}\hat{S}) - \mathcal{D}^{(k-1)}(X||\hat{A}\hat{S})}{\mathcal{D}^{(k)}(X||\hat{A}\hat{S})} \leq \epsilon. \quad (1.23)$$

- Le nombre d'itérations de l'algorithme est prédéfini.

D'autres critères d'arrêt avancés sont disponibles dans le Chapitre 1 de [33].

1.4.2.2 Algorithmes standard de NMF

Nous présentons dans ce paragraphe les familles d'algorithmes les plus répandues dans la littérature utilisées pour optimiser la fonction de coût Eq. (1.20). Pour chacune d'elle, nous décrivons le concept de base en nous limitant à la distance euclidienne Eq. (1.18) comme mesure de distance. Depuis les premiers travaux portant sur la NMF, de nombreuses variantes ont été proposées dans la littérature pour chacune de ces familles. Ces variantes ont souvent pour objectif soit d'accélérer la convergence des algorithmes, soit d'ajouter des contraintes supplémentaires à la fonction de coût \mathcal{J} afin de prendre en compte des propriétés supplémentaires disponibles sur les données. Nous reviendrons sur cet aspect dans le paragraphe suivant.

Algorithmes ALS La première version de la NMF, introduite par P. Paatero et U. Tapper [116] sous la dénomination de PMF, utilise comme méthode d'optimisation un algorithme ALS. Le principe de l'ALS est d'optimiser la fonction de coût Eq. (1.20) en procédant par

minimisation alternée suivant les deux variables A et S . A chaque itération, une des deux variables est fixée et l'autre est optimisée par moindres carrés. Afin de garantir la non négativité, le résultat de chaque équation de mise à jour est ensuite projeté sur l'orthant positif. On obtient alors les deux règles de mise à jour suivantes :

$$S \leftarrow [(A^T A)^{-1} A^T X]_+ \quad (A \text{ fixé}) \quad (1.24)$$

$$A \leftarrow [X S^T (S S^T)^{-1}]_+ \quad (S \text{ fixé}), \quad (1.25)$$

où $[P]_+$ est la projection de P sur l'orthant positif. En pratique cette projection est réalisée en remplaçant les valeurs négatives de P par une petite valeur positive ϵ : $[P]_+ = \max(\epsilon, P)$. Le lecteur pourra se référer au Chapitre 4 de [33] pour obtenir des détails supplémentaires et des versions différentes de l'algorithme ALS.

Algorithmes du Gradient Projeté Les algorithmes du gradient projeté sont une classe de méthodes classiques pour résoudre un problème d'optimisation. Le principe est de réaliser l'optimisation en cherchant les points stationnaires de la fonction de coût (dans le cas d'une optimisation convexe un unique point stationnaire existe pour la fonction de coût). Cette opération est réalisée par descente de gradient en incorporant la projection sur l'orthant positif des résultats des équations de mise à jour à chaque itération. Dans leur forme générale, les règles de mise à jour du gradient projeté sont définies par :

$$S \leftarrow [S - \eta_S \nabla_S \mathcal{J}(A, S)]_+ \quad (1.26)$$

$$A \leftarrow [A - \eta_A \nabla_A \mathcal{J}(A, S)]_+, \quad (1.27)$$

où $\nabla_S \mathcal{J}(A, S)$ (resp. $\nabla_A \mathcal{J}(A, S)$) est le gradient de la fonction de coût \mathcal{J} par rapport à S (resp. A). η_S et η_A sont deux pas d'apprentissage positifs. La difficulté de mise en œuvre des algorithmes du gradient provient du choix du pas d'apprentissage. Il peut être fixe, ou variable selon les méthodes et influe directement sur le point de convergence et la vitesse de convergence de l'algorithme. Des travaux portant sur le choix d'un pas d'apprentissage optimal sont disponible dans le Chapitre 5 de [33].

Algorithmes Quasi-Newton Projeté Les algorithmes Quasi-Newton projetés sont une extension des algorithmes du gradient projeté. Dans ces derniers, la fonction de coût Eq. (1.20) est optimisée grâce à une approximation du premier ordre (*i.e.* le gradient) de \mathcal{J} . Le principe des méthodes Quasi-Newton est d'utiliser une approximation du second ordre (le Hessien) de \mathcal{J} afin d'en trouver les points stationnaires. Notons $H_S = \nabla_S^2 \mathcal{J}(A, S)$ et $H_A = \nabla_A^2 \mathcal{J}(A, S)$ les Hessiens de \mathcal{J} suivant respectivement S et A . La forme générale des équations de mise à jour devient alors :

$$\text{vec}(S) \leftarrow [\text{vec}(S) - H_S^{-1} \text{vec}(\nabla_S \mathcal{J}(A, S))]_+ \quad (1.28)$$

$$\text{vec}(A) \leftarrow [\text{vec}(A) - H_A^{-1} \text{vec}(\nabla_A \mathcal{J}(A, S))]_+, \quad (1.29)$$

où $\text{vec}(P) = [p_{11}, p_{21}, \dots, p_{I1}, p_{12}, \dots, p_{IJ}]^T$ désigne la version vectorisée de la matrice $P \in \mathbb{R}^{I \times J}$. Le principal avantage des algorithmes Quasi-Newton est d'avoir une vitesse de convergence accélérée par rapport aux algorithmes du gradient grâce à la prise en compte de la courbure de la fonction de coût \mathcal{J} . On peut trouver des exemples d'algorithmes Quasi-Newton dans le chapitre 6 de [33].

Algorithmes Multiplicatifs La version de la NMF introduite par D.D. Lee et H.S. Seung [89] utilise comme méthode d’optimisation un algorithme multiplicatif. La simplicité d’implémentation et de mise en œuvre de cette méthode en fait l’une des méthodes les plus populaires. Elle est basée sur le même concept que l’algorithme du gradient projeté. Cependant, on exprime le pas d’apprentissage en fonction des paramètres A et S , l’idée étant de faire apparaître une multiplication dans les règles de mise à jour. C’est pourquoi on parle d’algorithmes multiplicatifs en opposition aux algorithmes additifs (du type gradient projeté) dans lesquels les matrices A et S sont mises à jour en leur ajoutant une variation pondérée par le pas d’apprentissage. En choisissant comme mesure la distance euclidienne Eq. (1.18), on obtient les règles de mise à jour multiplicatives suivantes :

$$S \leftarrow S \odot (A^T X) \oslash (A^T A S) \quad (1.30)$$

$$A \leftarrow A \odot (X S^T) \oslash (A S S^T), \quad (1.31)$$

où \odot et \oslash sont respectivement le produit et la division élément par élément. On remarque qu’en plus de ne pas avoir de pas d’apprentissage à calculer, les règles de mise à jour multiplicatives ne nécessitent pas d’étape de projection des résultats. En effet la non négativité de \hat{A} et \hat{S} est garantie par la structure des règles de mise à jour (à condition que l’initialisation soit non négative). Cependant, il n’est pas toujours possible d’établir des règles de mises à jour multiplicatives pour des fonctions de coût plus complexe, ceci dépendant de la distance choisie et d’éventuelles contraintes supplémentaires ajoutées au critère \mathcal{J} . Le lecteur pourra se référer au Chapitre 3 de [33] contenant plusieurs variantes d’algorithmes multiplicatifs (notamment en terme d’extension de cette approche à d’autres mesures).

1.4.2.3 Unicité et convergence

Les différents algorithmes de la NMF décrits ci-dessus, présentent deux inconvénients majeurs. Le premier, directement issu de la nature de la NMF, est la non unicité de la solution donnée par la NMF. Le second inconvénient provient de la non convexité de la fonction de coût \mathcal{J} à minimiser entraînant une sensibilité des algorithmes à l’initialisation.

Précédemment, nous avons montré que le problème de SAS générique pour un mélange linéaire instantané Eq. (1.16) est mal posé et possède une infinité de solutions. La factorisation d’une matrice non négative X en deux matrices non négatives souffre du même inconvénient, bien que le domaine des solutions possible soit réduit. En effet si le couple $\{\hat{A}, \hat{S}\}$ est une solution, alors $\{\hat{A}P^{-1}, P\hat{S}\}$ est aussi une solution pour toute matrice P inversible telle que :

$$X \approx \hat{A}P^{-1}P\hat{S} \quad \text{tq. } \hat{A}P^{-1} \geq 0 \text{ et } P\hat{S} \geq 0. \quad (1.32)$$

Notons qu’il n’est pas nécessaire que P ou que P^{-1} soit non négative pour vérifier cette relation. Ainsi le problème d’optimisation Eq. (1.21) possède une infinité de solutions, sous la seule contrainte de non négativité. Cette indétermination s’ajoute aux indéterminations standard de permutation et d’échelle de la SAS (voir Section 1.3.2). Les travaux de D.L. Donoho [54] puis de S. Moussaoui [108] donnent une étude détaillée de l’unicité des solutions de la NMF. D’un point de vue géométrique, en considérant chaque observation x_m comme un élément de l’espace vectoriel \mathbb{R}^N , la NMF revient à identifier le plus petit cône inclus dans l’orthant positif contenant le nuage de points des observations. On représente cette situation

en 2D sur la Figure 1.4. Intuitivement, on remarque que le cône englobant le nuage de points n'est pas unique. D.L. Donoho et S. Moussaoui montrent qu'une condition supplémentaire à la non négativité est nécessaire pour conduire à l'unicité de la solution. Cependant ces *a priori* sur les données sont difficilement justifiables dans le cas de données réelles.

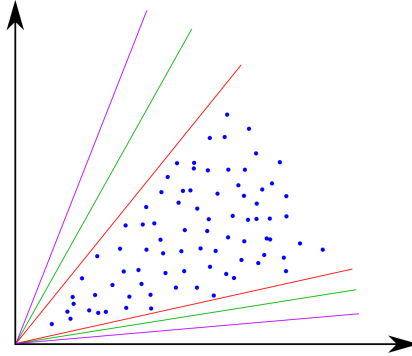


FIGURE 1.4 – Illustration des cônes englobant le nuage de points des observations x_m dans un espace à deux dimensions ($N = 2$).

Par ailleurs, la fonction de coût \mathcal{J} à minimiser pour résoudre le problème de la NMF est non convexe simultanément suivant les deux variables A et S . La fonction de coût est strictement convexe suivant une variable, l'autre étant fixée. La fonction de coût à optimiser contient donc des minima locaux. Ainsi les différentes méthodes d'optimisation présentées ci-dessus convergent généralement vers un minimum local, le point de convergence dépendant fortement du point d'initialisation de l'algorithme. Une initialisation aléatoire peut donc conduire à une solution non satisfaisante.

Plusieurs approches sont disponibles dans la littérature afin de compenser ces deux inconvénients, en adoptant par exemple différentes stratégies d'initialisation pour éviter les minima locaux ou encore en ajoutant des contraintes supplémentaires afin de réduire le domaine des solutions possibles. On présente ci-dessous quelques unes de ces méthodes.

Initialisation Le point de convergence optimal des algorithmes de NMF dépend fortement de la distance entre le point initial et le minimum global de la fonction de coût. Une initialisation aléatoire n'est donc pas satisfaisante. Il existe dans la littérature plusieurs approches afin d'obtenir une initialisation conduisant à une fonction de coût la plus faible possible.

Les travaux de A.N. Langville *et al.* [86] comparent les performances de six méthodes d'initialisation différentes. Parmi elles, on trouve des approches basées sur la Décomposition en Valeurs Singulières (SVD pour *Singular Value Decomposition* en anglais), sur des méthodes de classification ou encore sur une initialisation par les données. On notera que le choix et les performances de ces méthodes d'initialisation dépend de l'application et des données. On mentionnera également les travaux [25, 124, 138] portant sur les méthodes d'initialisation de la NMF.

Une autre approche est d'utiliser une initialisation multiple (Chapitre 1 de [33]). Le principe est de réaliser un certain nombre de factorisations avec une initialisation aléatoire et un

petit nombre fixé d'itérations. On choisit ensuite l'initialisation ayant donné la fonction de coût \mathcal{J} la plus faible ou celle dont la décroissance de \mathcal{J} a été la plus rapide. Puis on effectue la NMF avec cette initialisation jusqu'à la convergence définie selon l'un des critères d'arrêt mentionnés précédemment.

On trouve aussi dans la littérature une approche basée sur l'hybridation de la NMF avec une autres méthodes de SAS [11]. L'idée de cette méthode hybride est d'utiliser dans un premier temps une ICA modifiée pour effectuer la factorisation. L'utilisation d'une méthode ICA, dans un cas ou les conditions d'utilisation ne sont pas tout à fait satisfaites, permet d'obtenir une approximation grossière de la factorisation. Cette approximation est ensuite utilisée comme initialisation de la NMF. Nous reviendrons en détail sur ces méthodes hybrides dans les Chapitres 3 et 4 dans lesquels nous utilisons des méthodes de SCA pour initialiser la NMF.

Structure Multi-Couches Une solution possible pour d'éviter les minima locaux lors de l'optimisation de \mathcal{J} est d'utiliser une structure multi-couches pour les différents algorithmes détaillés précédemment. Le principe est d'estimer la matrice A en cascade par K NMF successives. Le modèle initial $X \approx \hat{A}\hat{S}$ devient alors :

$$X \approx \hat{A}^{(1)}\hat{A}^{(2)} \dots \hat{A}^{(K)}\hat{S}^{(K)}, \quad (1.33)$$

où $\hat{A}^{(k)}$ est l'estimation de A à la $k^{ième}$ couche de la structure. La séquence d'estimation prend alors la forme suivante : la première couche est donnée par le modèle $X \approx \hat{A}^{(1)}\hat{S}^{(1)}$, puis les couches suivantes sont estimées selon $\hat{S}^{(k-1)} \approx \hat{A}^{(k)}\hat{S}^{(k)}$ avec $k \in [2, K]$. A chaque couche K de l'algorithme, on utilise une initialisation aléatoire et multiple.

La décomposition du problème de factorisation en K sous factorisations successives, chacune estimée avec une initialisation différente, permet d'augmenter les performances de la NMF et réduisant le risque de converger vers un minimum local de \mathcal{J} (voir par exemple le Chapitre 1 de [33] et les travaux qui y sont référencés).

Analyse Monte Carlo Une autre solution possible pour réduire l'influence des minima locaux est de procéder à l'estimation des sources S par une analyse Monte Carlo. Le principe de cette méthode introduite par O. Berné [15] est de réaliser un grand nombre K de factorisations avec une initialisation aléatoire pour chaque estimation. On obtient ainsi K estimations différentes de la matrice S , contenant chacune L sources. L'ensemble des $K \times L$ sources (*i.e.* lignes de S) sont ensuite regroupées par une méthode de classification (k-means [131] dans cet exemple). On obtient donc L clusters contenant chacun K estimations de la même source. Les sources finales sont obtenues en déterminant le centre de chaque cluster, en utilisant la moyenne ou la médiane des individus par exemple. Enfin, l'estimation de la matrice A est réalisée par moindres carrés non négatifs (NNLS pour *NonNegative Least Square* en anglais) [88]. Cette méthode permet en plus de quantifier la dispersion des solutions données par la NMF en estimant la variance intra-classe des individus.

Normalisation Il est possible d'introduire différentes normalisations à chaque itération des algorithmes de la NMF. Ces normalisations permettent de réduire le domaine des solutions possibles en compensant l'indétermination d'échelle de la décomposition. Les normalisations

possibles sont souvent dictées par l'application considérée. On pourra par exemple forcer la somme des coefficients de chaque ligne de A à être unitaire afin de définir les coefficients de mélange comme étant des proportions (nous reviendrons sur ce cas dans la Section 2.2.1).

Contraintes de régularisation Certaines applications permettent de formuler des hypothèses supplémentaires sur les données. Ainsi, dans l'objectif de réduire le nombre de solutions admissibles de la NMF, il est possible de prendre en compte ces informations *a priori* dont on dispose sur les sources et/ou sur les coefficients de mélange pour contraindre davantage le problème d'optimisation de A et S . En pratique, l'utilisation de contraintes supplémentaires se traduit par l'ajout de termes de régularisation à la mesure de similarité \mathcal{D} . La fonction de coût \mathcal{J} prenant en compte ces *a priori* s'exprime, dans sa forme générale, selon :

$$\mathcal{J}(A, S) = \mathcal{D}(X||AS) + \lambda_A J_A(A) + \lambda_S J_S(S) \quad A \geq 0, S \geq 0, \quad (1.34)$$

où les fonctions de pénalisations $J_A(A)$ et $J_S(S)$ permettent de forcer la solution à adopter les propriétés souhaitées et les paramètres de régularisation λ_A et λ_S expriment le poids que l'on accorde aux propriétés de A et S . Par exemple, plus la valeur λ_A sera élevée, plus la propriété définie par J_A sera imposée à l'estimation de A . Le choix des propriétés imposées aux matrices dépend de l'application, mais on trouve régulièrement dans la littérature les deux contraintes suivantes :

- *Contrainte de parcimonie* : Un signal ou une matrice est dit parcimonieux si la majeure partie de ses coefficients est nulle ou négligeable. Une mesure classique de la parcimonie est la norme ℓ_1 . Par exemple, on souhaite que les sources estimées par la NMF soient parcimonieuses, on utilisera alors comme contrainte sur S la fonction de pénalisation [68, 81] :

$$J_S(S) = \sum_{\ell=1}^L \|s_\ell\|_1. \quad (1.35)$$

- *Contrainte de lissage* : L'allure d'un signal est lisse si ce signal est à valeurs continues et n'a pas de variation brusque. Une mesure classique utilisée pour cette contrainte est la norme ℓ_2 . Par exemple, on souhaite que les signaux sources estimés par la NMF soient lisses, on utilisera alors comme contrainte sur S la fonction de pénalisation [31, 55] :

$$J_S(S) = \sum_{\ell=1}^L \|s_\ell\|_2^2. \quad (1.36)$$

On trouve dans la littérature d'autres propriétés imposées aux sources ou aux coefficients de mélange, par exemple on peut mentionner la décorrélation des sources ou encore des contraintes géométriques. Pour cette dernière propriété, nous mentionnerons une méthode particulière dans la Section 2.4.2.2. Le lecteur pourra se référer aux travaux [33] pour plus de détails sur les contraintes de pénalisations utilisées pour la NMF.

1.4.3 Analyse en composantes parcimonieuses

Les méthodes de SCA sont apparues dans le domaine de la SAS au début des années 2000. Depuis, elles sont abondamment étudiées par la communauté scientifique et se retrouvent dans

de nombreux domaines d'applications. Elles sont basées sur des propriétés de parcimonie des signaux que nous allons détailler.

Définition 1 : Un signal est dit parcimonieux dans un domaine de représentation si la plupart de ses échantillons sont nuls ou, en pratique, négligeables.

Cette définition générale de la parcimonie introduit deux notions à compléter, d'une part la notion de domaine de représentation et d'autre part le nombre d'échantillons négligeables définissant le degré de parcimonie d'un signal.

La propriété de parcimonie est intimement liée au domaine de représentation d'un signal (temporel, fréquentiel, spatial, temps-fréquence, temps-échelle...). En effet, un signal peut présenter des propriétés de parcimonie dans un domaine particulier sans qu'il en soit de même dans d'autres. Cette propriété est illustrée sur la Figure 1.5. Le signal audio présenté ici n'est pas parcimonieux en représentation temporelle. En revanche, en représentation temps-fréquence, sur une grande proportion de fenêtres temps-fréquence, les valeurs sont négligeables pour l'analyse d'un tel signal.

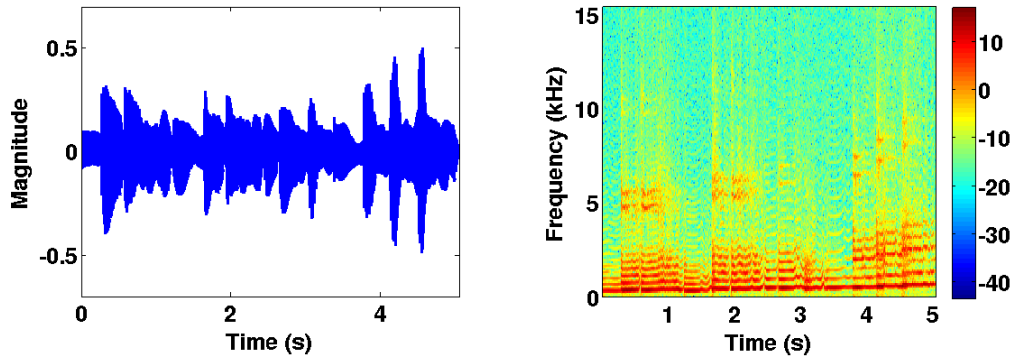


FIGURE 1.5 – Représentation temporelle (à gauche) et temps-fréquence (à droite) d'un signal audio.

Le degré de parcimonie d'un signal dans un domaine de représentation donné est relié au nombre d'échantillons négligeables du signal considéré. Ainsi, on peut distinguer les signaux fortement parcimonieux pour lesquels seuls quelques échantillons sont non négligeables (en proportion de l'ensemble des échantillons), des signaux faiblement parcimonieux où seuls quelques échantillons sont négligeables.

Dans le cadre de la SAS, on traite un ensemble de signaux observés qui sont issus du mélange d'un ensemble de signaux sources. On s'intéresse donc plus particulièrement aux propriétés que présentent conjointement l'ensemble de ces signaux et non aux propriétés des signaux individuels telles que celles définies ci-dessus (bien que celles-ci soient liées) [45, 46]. Il est donc nécessaire d'étendre les propriétés des signaux individuels au problème de SAS pour pouvoir exploiter la parcimonie.

1.4.3.1 Parcimonie conjointe

Pour réaliser la séparation des signaux observés en utilisant des propriétés de parcimonie, l'approche la plus simple est d'isoler chaque source dans des petites zones Z du domaine de représentation considéré.

Ces zones d'analyse sont constituées, dans la majorité des cas, de quelques échantillons adjacents des signaux (typiquement quelques dizaines) mais nous verrons dans la Section 1.4.5 qu'il existe des méthodes pour lesquelles les zones d'analyse sont réduites à un seul échantillon (aux prix de contraintes supplémentaires). On s'intéresse en particulier au nombre de sources actives dans ces zones d'analyse.

Définition 2 : Une source est active dans une zone d'analyse Z si sa puissance moyenne est non nulle dans cette zone.

Définition 3 : Une source est isolée dans une zone d'analyse Z si elle est la seule à être active. Les zones contenant une source isolée sont appelées zones mono-sources.

La propriété de parcimonie conjointe décrit le nombre de zones mono-sources présentes dans le domaine de représentation des données. Comme pour la parcimonie d'un signal individuel, nous pouvons définir un degré de parcimonie conjointe. Dans le cas idéal, les sources ont un support complètement disjoint. Autrement dit, dans chaque échantillon du domaine de représentation, une seule source (au plus) est active. Ce fort degré de parcimonie des sources est classiquement appelé WDO (pour *W-Disjoint-Orthogonality* en anglais). Ce scénario est illustré sur la Figure 1.6. Les signaux mélangés sont donc composés, à chaque instant de la contribution d'une unique source (au plus).

A contrario, un faible degré de parcimonie entraîne l'existence de seulement quelques zones d'analyse (possiblement une unique zone par source) du domaine de représentation dans lesquelles une source est isolée. On parle alors de sources quasi-non-parcimonieuses (QNS pour *Quasi Non-Sparse* en anglais). Ce scénario est illustré sur la Figure 1.7. On remarque que les signaux mélangés contiennent la contribution des deux sources la plupart du temps sauf sur de petits intervalles où une seule source est présente.

Ces deux cas concernant le degré de parcimonie conjointe des sources conduisent à deux catégories de méthodes de SCA. Par ailleurs, comme nous l'avons mentionné précédemment, un signal peut être parcimonieux dans un domaine de représentation sans qu'il le soit dans un autre. Cette propriété est également valable pour la parcimonie conjointe.

1.4.3.2 Espace de représentation

Afin de faire apparaître des propriétés de parcimonie sur les signaux sources (individuelles entraînant la parcimonie conjointe), il est parfois nécessaire d'appliquer une transformation parcimonieuse des signaux observés. Prenons l'exemple des deux signaux sources audio actifs à chaque instant de la Figure 1.8. Dans le domaine temporel, ces deux signaux sources ne sont pas conjointement parcimonieux. Cependant, on remarque qu'il existe des fenêtres temps-fréquence où une seule des deux sources a des valeurs non négligeables (*e.g.* seule la source 1 est active dans les basses fréquences). Ces sources ne seront donc pas parcimonieuses

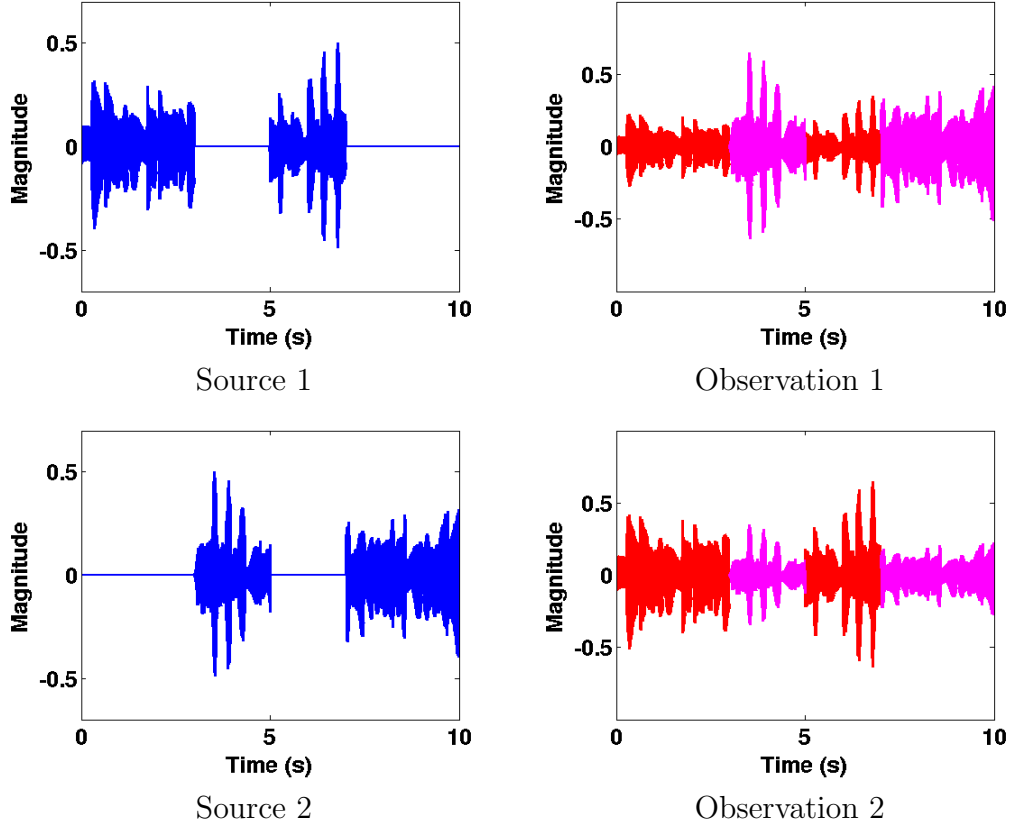


FIGURE 1.6 – Mélanges de deux sources WDO. Les deux signaux sources de supports totalement disjoints sont représentés à gauche et les deux signaux mélangés à droite. Les intervalles de temps ne contenant que la source 1 sont en rouge, ceux ne contenant que le source 2 sont en violet.

(QNS) en représentation temporelle mais le seront en représentation temps-fréquence.

Idéalement, l'utilisation d'une telle transformation doit conserver la linéarité du modèle de mélange Eq. (1.16) et conserver les paramètres du mélange. Par exemple notons $x(n) = As(n)$ le signal mélangé observé x à l'échantillon n . Après passage dans un domaine de représentation parcimonieux, le modèle de mélange linéaire doit être conservé. On a alors : $\tilde{x}(\nu) = A\tilde{s}(\nu)$, où la variable ν contient les paramètres du nouveau domaine de représentation (*e.g.* $\nu = (t, \omega)$ pour une représentation temps-fréquence).

Dans le cadre de nos travaux, les données dont nous disposons sont “naturellement” parcimonieuses. Nous n'utiliserons donc aucune transformation préalable des signaux observés. Cependant, nous mentionnons certaines transformations communément utilisées en SCA : la DCT (pour *Discrete Cosine Transform* en anglais), la STFT (pour *Short-Time Fourier Transform* en anglais) ou encore la CWT (pour *Continuous Wavelet Transform* en anglais). Pour plus de détails sur ces transformations et leurs utilisations en SCA, le lecteur pourra consulter le Chapitre 10 de [37], les travaux [45, 46, 48, 122] ainsi que les références qui y sont citées.

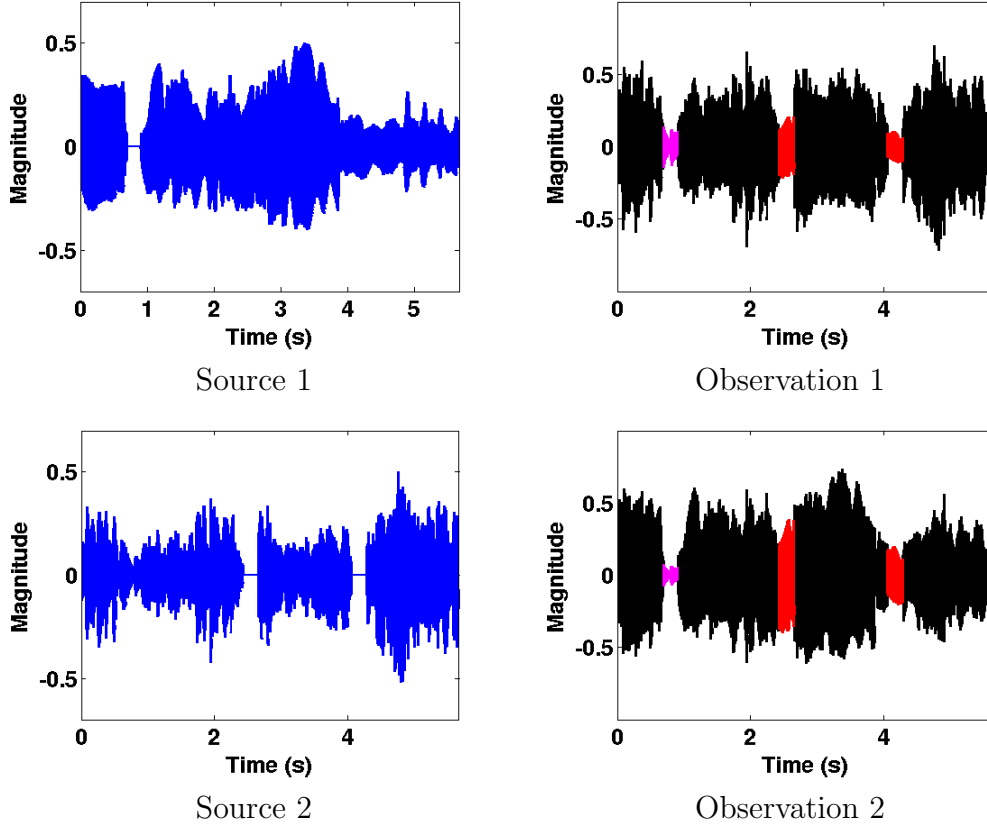


FIGURE 1.7 – Mélanges de deux sources QNS. Les deux signaux sources ont un support recouvrant sauf sur quelques intervalles de temps. Les sources sont représentées à gauche et les deux signaux mélangés à droite. Les échantillons ne contenant que la source 1 sont en rouge, ceux ne contenant que le source 2 sont en violet et les échantillons contenant la contribution des deux sources sont en noir.

1.4.3.3 Catégories de méthodes de SCA

Méthodes basées sur l'hypothèse de sources WDO Cette catégorie de méthodes impose une forte contrainte de parcimonie sur les sources. Un algorithme classique de ce type de méthodes est DUET (pour *Degenerate Unmixing Estimation Technique* en anglais) proposé par S. Rickard *et al.* [75]. Dans sa version originale, cette méthode est conçue pour séparer des mélanges à atténuation et à retard sur deux capteurs et $L \geq 2$. Le principal avantage de cette approche est de permettre de séparer des mélanges sous-déterminés (au détriment d'une forte contrainte sur les sources). Cependant, de nombreux travaux dans la littérature proposent des extensions de DUET permettant de relaxer la contrainte WDO [126, 140]. On mentionnera également les travaux de S. Rickard *et al.* [125] proposant la méthode DESPRIT qui permet la prise en compte d'un plus grand nombre d'observations $M \geq 2$ combiné à une version plus relâchée de la contrainte WDO. On peut citer également les travaux de J. Rosca *et al.* [127] dans lesquels la condition de WDO est ramenée à $M - 1$ sources (où M est le nombre d'observations).

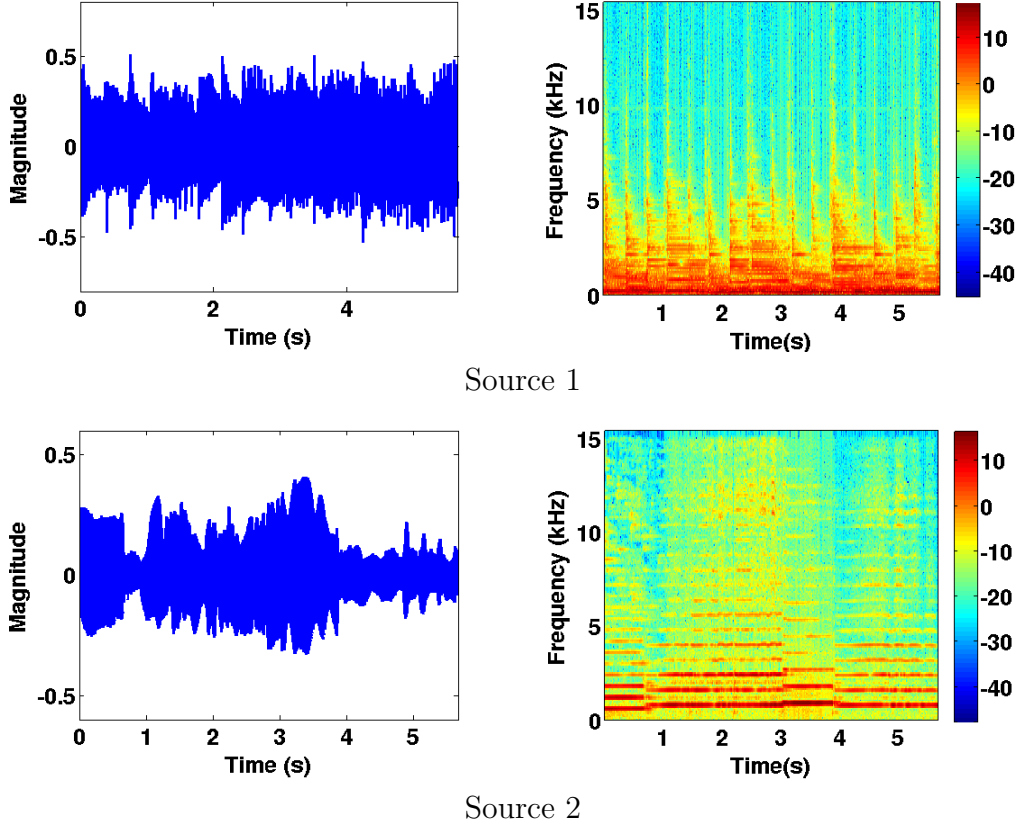


FIGURE 1.8 – Représentation temporelle (à gauche) et temps-fréquence (à droite) de deux signaux audio. Ces deux sources sont conjointement parcimonieuses (QNS) en représentation temps-fréquence.

Dans notre contexte astrophysique, les données sur lesquelles nous travaillons ne sont pas issues du mélange de sources disjointes. De plus, les mélanges que nous considérons sont largement sur-déterminés ce qui ne justifie pas l'utilisation de ce type de méthodes. C'est pourquoi nous ne détaillerons pas dans ce manuscrit ces différentes approches.

Méthodes basées sur l'hypothèse de sources QNS Cette catégorie de méthodes, en opposition aux méthodes basées sur l'hypothèse de sources WDO, relâche considérablement la contrainte de parcimonie des sources. Plusieurs méthodes utilisant la QNS des sources ont été développées dans notre équipe par Y. Deville *et al.* [45, 46] parmi lesquelles on peut mentionner :

- Les méthodes TiFROM (pour *Time-Frequency Ratios Of Mixtures* en anglais) et TempROM (pour *Temporal Ratios Of Mixtures* en anglais) [1, 2, 3]. Ces méthodes détectent les zones mono-sources en étudiant la variance des rapports d'observations.
- Les méthodes TiFCORR (pour *Time-Frequency CORRelation-based BSS* en anglais) et TempCORR (pour *Temporal CORRelation-based BSS* en anglais) [43, 50]. Ces méthodes sont basées sur la même structure que les méthodes de type “ROM” mais

détection des zones mono-sources en utilisant un critère basé sur la corrélation.

- La méthode TiSCORR (pour *Time-Scale Ratios Of Mixtures* en anglais) [48]. Cette approche est une variante de TiFCORR en appliquant une transformation parcimonieuse basée sur les ondelettes.

L’hypothèse générale de ces méthodes est qu’il existe, pour chaque source, de petites zones du domaine de représentation où seule cette source est présente. Les sources peuvent être recouvrantes dans le reste du domaine de représentation.

Nous portons un intérêt particulier à cette catégorie de méthodes puisqu’elles se prêtent bien à la séparation de nos données astrophysiques et constituent également le socle de plusieurs de nos contributions que nous détaillons dans ce manuscrit. Dans la suite de cette section, nous énonçons le principe général commun à ces méthodes puis nous décrivons différents critères de détection des zones mono-sources.

1.4.3.4 Principe général des méthodes QNS

L’hypothèse de départ des méthodes basées sur la QNS des sources est l’existence de zones mono-sources pour chacune des sources présentes dans le mélange considéré.

Définition 4 : Une source est accessible dans le domaine de représentation s’il existe au moins une zone d’analyse Z où elle est isolée.

Hypothèse 1 : Chaque source est accessible dans le domaine de représentation considéré.

La structure générale des méthodes basées sur la QNS des sources est la suivante :

1. Étape de transformation parcimonieuse (optionnelle)
2. Étape de détection des zones mono-sources
3. Étape d’estimation de la matrice de mélange
4. Étape de reconstruction des sources

Étape de transformation parcimonieuse Cette étape optionnelle permet de représenter les signaux observés dans le domaine d’analyse le plus parcimonieux possible au sens de l’*Hypothèse 1* (parcimonie conjointe des sources).

Étape de détection des zones mono-sources Cette étape permet de détecter toutes les zones mono-sources du mélange considéré. Plusieurs critères de détection sont possibles et conduisent aux différentes familles de méthodes proposées par Y. Deville *et al.*

Étudions les caractéristiques des observations au sein d’une zone mono-source Z contenant l’unique source d’indice ℓ_0 . À partir de l’expression du mélange linéaire des signaux $x(\nu) = As(\nu)$ (on omettra le “tilde” par la suite pour alléger la notation), on déduit que les M observations (éventuellement transformées) de la zone Z s’expriment sous la forme :

$$x_m(\nu_z) = a_{m\ell_0}s_{\ell_0}(\nu_z) \quad m \in \{1, \dots, M\}, \quad (1.37)$$

où ν_z sont les indices des échantillons appartenant à la zone Z . On remarque alors que les signaux observés x_m sont tous proportionnels dans une zone mono-source. Les auteurs proposent alors plusieurs critères pour détecter la proportionnalité des signaux dans les zones d'analyse afin de distinguer les zones mono-sources des zones multi-sources.

Dans les méthodes TiFROM et TempROM, les zones mono-sources sont distinguées en étudiant la variance des rapports des observations notés :

$$\alpha_m(\nu_z) = \frac{x_m(\nu_z)}{x_1(\nu_z)} \quad m \in \{2, \dots, M\}. \quad (1.38)$$

On précise que le choix du signal observé d'indice 1 comme signal de référence est arbitraire. Il peut être remplacé par toutes autres observations. Le choix du signal de référence n'a pas d'influence sur la méthode dans un cas théorique non bruité. En pratique on choisira comme signal de référence le signal ayant la plus grande puissance afin de limiter le risque d'avoir comme référence un signal fortement bruité.

Si une source est isolée dans la zone Z , le rapport des observations sera constant en tout points ν_z de la zone d'analyse. En effet si la source d'indice ℓ_0 est isolée dans la zone Z (Eq. 1.37), alors ce rapport s'écrit :

$$\alpha_m(\nu_z) = \frac{a_{m\ell_0}}{a_{1\ell_0}}. \quad (1.39)$$

Afin de garantir l'existence des rapports d'observations dans chaque zone d'analyse, on évitera les divisions par zéro en prenant les précautions suivantes :

Hypothèse 2 : Dans chaque zone d'analyse Z , au moins une source est active et pour une zone mono-source, tous les coefficients de mélange associés à cette source sont non nuls (i.e. $a_{m\ell_0} \neq 0, \forall m \in \{1, \dots, M\}$).

En pratique, cette hypothèse est toujours satisfaite dû à la présence de bruit dans les données. De plus, afin de garantir que les rapports d'observations distinguent les zones mono-sources des zone multi-sources, il est nécessaire d'introduire la contrainte suivante sur les sources :

Hypothèse 3 : Si plusieurs sources sont actives dans une zone d'analyse Z , elles doivent varier suffisamment afin que le rapport $\alpha_m(\nu_z)$, $m \in \{1, \dots, M\}$, ne soit pas constant pour tous les indices ν_z . En particulier, les sources ne doivent pas varier de façon cohérente (i.e. proportionnelle) dans une zone d'analyse.

Le critère utilisé pour détecter les zones mono-sources dans les méthodes de type "ROM" est alors le suivant :

Propriété 3 : Une zone d'analyse Z est mono-source si et seulement si la variance des rapports des observations est nulle :

$$\text{var}_{\nu_z}\{\alpha_m(\nu_z)\} = 0 \quad \forall m \in \{2, \dots, M\}, \quad (1.40)$$

où l'opérateur "var" définit la variance sur les échantillons des signaux considérés.

La *Propriété 3* est alors utilisée comme suit pour mesurer la qualité mono-source q_Z d'une zone. Pour chaque zone d'analyse Z , on calcule le paramètre suivant :

$$q_Z = \underset{m}{\text{mean}}\{\underset{\nu_z}{\text{var}}\{\alpha_m(\nu_z)\}\}, \quad (1.41)$$

où l'opérateur “mean” définit la moyenne arithmétique sur les observations. Si la mesure q_Z est inférieure à un seuil proche de 0, alors la zone d'analyse est mono-source. Plusieurs applications peuvent être utilisées pour définir cette mesure de qualité mono-source d'une zone. En effet, la moyenne peut être remplacée par le maximum “max”, la mesure sera donc très restrictive sur la qualité mono-source d'une zone. A contrario l'opérateur minimum “min” définira une mesure plus souple. La moyenne ou encore la médiane définissent quant à elles des restrictions intermédiaires souvent utilisées en présence de bruit.

Une autre approche pour détecter les zones mono sources est d'utiliser les coefficients d'intercorrélation des signaux observés dans une zone Z . C'est la méthode utilisée dans les méthodes TiFCORR et TempCORR. Notons $R\{x_1, x_m\}(Z)$ l'intercorrélation non centrée des observations d'indices 1 et m :

$$R\{x_1, x_m\}(Z) = \frac{1}{\text{Card}(Z)} \sum_{\nu \in Z} x_1(\nu) x_m^*(\nu) \quad m \in \{2, \dots, M\}, \quad (1.42)$$

où $x_m^*(\nu)$ est la conjugaison complexe de $x_m(\nu)$ et $\text{Card}(Z)$ est le nombre d'échantillons dans la zone Z . Le coefficient de corrélation correspondant s'exprime alors selon :

$$\rho\{x_1, x_m\}(Z) = \frac{R\{x_1, x_m\}(Z)}{\sqrt{R\{x_1, x_1\}(Z) \times R\{x_m, x_m\}(Z)}} \quad m \in \{2, \dots, M\}. \quad (1.43)$$

De nouveau, afin de garantir l'existence des coefficients de corrélation dans chaque zone d'analyse, on évitera les divisions par zero en supposant l'*Hypothèse 2* définie précédemment. De plus, l'*Hypothèse 3* est reformulée pour s'assurer que le coefficient de corrélation distingue les zones mono-sources des zones multi-sources :

Hypothèse 4 : Si plusieurs sources sont actives dans une zone d'analyse Z , elles sont toutes linéairement indépendantes.

Le critère utilisé pour détecter les zones mono-sources dans les méthodes de type “CORR” est alors le suivant :

Propriété 4 : Une zone d'analyse Z est mono-source si et seulement si :

$$|\rho\{x_1, x_m\}(Z)| = 1 \quad \forall m \in \{2, \dots, M\}. \quad (1.44)$$

La *Propriété 4* est alors utilisée comme suit pour mesurer la qualité mono-source q_Z d'une zone. Pour chaque zone d'analyse Z , on calcule le paramètre suivant :

$$q_Z = \underset{m}{\text{mean}}\{|\rho\{x_1, x_m\}(Z)|\}. \quad (1.45)$$

Si la mesure q_Z est supérieure à un seuil proche de 1, alors la zone d'analyse est mono-source. De nouveau, la moyenne peut être remplacée par des fonctions d'agrégation telles que le minimum, le maximum, la médiane... afin de rendre la mesure plus ou moins tolérante quant à la qualité mono-source d'une zone.

Étape d'estimation de la matrice de mélange L'étape précédente permet de localiser toutes les zones mono-sources présentes dans les données. Comme mentionné précédemment, à chaque zone mono-source correspond une colonne de la matrice de mélange A . Ainsi l'ensemble des zones mono-sources permet d'estimer toutes les colonnes de la matrice de mélange aux indéterminations standard de la SAS près. La méthode d'estimation des colonnes de la matrice de mélange dépend du critère choisi pour détecter les zones mono-sources.

Pour les méthodes de type "ROM" basées sur les rapports des observations, l'estimation des colonnes de la matrice de mélange est effectuée directement à partir des rapports d'observations $\alpha_m(\nu_z)$. On remarque alors qu'on obtient une estimation normalisée de la colonne de la matrice de mélange, le premier élément de la colonne étant égal à 1, les autres ayant un coefficient d'échelle de $\frac{1}{a_{1\ell_0}}$. En pratique, on utilise la moyenne (ou la médiane) des rapports des observations suivant les indices d'échantillons de la zone afin de rendre l'estimation plus robuste. L'estimation de la colonne relative à la $\ell^{ième}$ source s'écrit alors :

$$\hat{a}_\ell = \text{mean}_{\nu_z} \{ \alpha_m(\nu_z) \}, \quad (1.46)$$

où \hat{a}_ℓ est l'estimation de la $\ell^{ième}$ colonne de \hat{A} .

Pour les méthodes de type "CORR" basées sur les coefficients de corrélation des observations, l'estimation des colonnes de la matrice de mélanges est donnée par le rapport des intercorrélations des signaux observés dans la zone Z . A partir de l'expression des observations contenues dans une zone mono-source Z contenant la $\ell^{ième}$ source, Eq. (1.37), le rapport s'écrit suivant :

$$\frac{R\{x_1, x_m\}(Z)}{R\{x_1, x_1\}(Z)} = \frac{a_{m\ell_0}}{a_{1\ell_0}} \quad \forall m \in \{1, \dots, M\}. \quad (1.47)$$

De nouveau, on remarque que l'on obtient une estimation normalisée de la colonne de la matrice de mélange.

Indépendamment de la méthode d'estimation des colonnes de la matrice de mélange, on obtient au final une estimation d'une colonne pour chaque zone mono-source. Cependant plusieurs zones mono-sources relatives à la même source sont généralement détectées dans les données. Il est donc nécessaire d'agréger ces estimations afin d'obtenir l'estimation de la matrice A . Plusieurs stratégies sont possibles pour réaliser cette agrégation.

Dans la version originale des méthodes, les auteurs proposent de classer les zones mono-sources par ordre décroissant de qualité mono-sources q_Z (mesure donnée soit par la moyenne de la variance des rapports d'observations, soit par la moyenne des coefficients de corrélation). En considérant successivement chaque zone mono-source de la liste ordonnée, une nouvelle colonne est conservée si sa distance par rapport aux colonnes précédemment identifiées est supérieure à un seuil défini par l'utilisateur. On considère ainsi que la zone courante ne

contient pas la même source que les précédentes. La procédure s’arrête lorsque le nombre de colonnes estimées est égal au nombre de sources présentes dans les données. Une variante possible de cette approche permet de ne pas avoir la connaissance préalable du nombre de sources présentes dans les données. En effet, on peut laisser l’estimation se poursuivre tant qu’il reste des zones mono-sources dans la liste ordonnée. Ainsi le nombre de colonnes estimées dépendra du seuil sur la distance entre les colonnes choisie et du seuil sur la qualité mono-source des zones d’analyse.

Une autre possibilité est de procéder par classification. On réalise toutes les estimations des colonnes issues des zones mono-sources de qualité suffisante. On procède ensuite à la classification de ces colonnes avec, par exemple, l’algorithme du k-means [131]. Les colonnes retenues seront alors les centres de chaque cluster identifié, ou encore, la colonne du cluster ayant le meilleur coefficient de qualité mono-source. Une approche avancée [78] permet de prendre en compte la mesure de qualité mono-source dans la classification par des approches “flou” (e.g. fuzzy k-means [131]).

Étape de reconstruction des sources Cette étape consiste à extraire les signaux recherchés à partir des observations et de l’estimation de la matrice de mélange \hat{A} . Une estimation des sources à une permutation et un facteur d’échelle est donnée par :

$$\hat{S}(\nu) = \hat{A}^{-1}X(\nu). \quad (1.48)$$

Enfin une transformation inverse est effectuée sur les sources estimées (si une transformation parcimonieuse a été préalablement effectuée). On note qu’il est préférable de réaliser l’estimation des sources dans le domaine original de représentation des données ($\hat{S} = \hat{A}^{-1}X$). Dans le cas de mélanges sous-déterminés, les sources estimées ne sont reconstruites que partiellement (pour plus de détail sur l’application de ces méthodes aux mélanges sous-déterminés voir [1, 45, 50]).

L’avantage de ce type de méthodes par rapport à la première catégorie basée sur la WDO, est qu’elles nécessitent une faible hypothèse de parcimonie. Cependant, pour ce faire, il est nécessaire de fixer un certain nombre de paramètres comme la taille des zones d’analyse, leur recouvrement, le seuil sur la distance entre les estimations des colonnes de la matrice de mélange, ou encore le critère choisi pour la détection des zones mono-sources. Les performances des méthodes QNS sont directement liées au choix de ces paramètres. Plusieurs études quantifient l’impact de ces différents paramètres sur les résultats [45, 50, 102, 122]. Nous reviendrons sur ce point dans le Chapitre 3 lié à nos propres simulations.

1.4.3.5 SpaceCORR

Dans leurs versions originales, les méthodes du type “TiF/Temp/TiS - ROM/CORR” ont été développées pour des signaux mono-dimensionnels dans leurs représentations originales. Or, les méthodes de type “TiF” ou “TiS” réalisent la séparation en travaillant sur un espace transformé en 2 dimensions (respectivement l’espace temps-fréquence et temps-échelle) et sont donc extensibles aux traitements des images pour lesquelles les observations et les sources sont dans un domaine spatial à 2 dimensions. En 2010, I. Meganem *et al.* [102] ont proposé une méthode dérivée de TiFCORR pour la séparation d’images (i.e. des signaux

bi-dimensionnels dans leur représentation originale). L'utilisation de méthode de SAS mono-dimensionnelle est possible pour séparer des images en les arrangeant sous forme de vecteurs, cependant l'information spatiale est alors perdue (e.g. homogénéité spatiale, comportement local des contours...). L'idée des méthodes proposées par I. Meganem *et al.* est de séparer les images sources en conservant leurs structures spatiales. Ces méthodes, basées sur le critère de détection utilisant la corrélation décrit précédemment, se déclinent en deux versions. La première, considérant les sources présentes dans le domaine spatial de l'image, est appelée SpaceCORR. La seconde est une variante de SpaceCORR en appliquant au préalable une transformation parcimonieuse, consistant à représenter les images dans le domaine des ondelettes. Cette seconde version est alors naturellement appelée WaveCORR. Notons que ces deux approches reprennent les différentes étapes communes aux méthode QNS introduites précédemment.

Par la suite, la méthode SpaceCORR a été étendue au cas des images hyperspectrales par les travaux de S. Karoui *et al.* [78, 79] dans un contexte d'observation de la Terre. Nous reviendrons en détail sur ces méthodes dans la Section 2.4.1.3 puisque certaines précisions sont à apporter sur les contraintes imposées par ce champ d'application.

Pour les besoins de nos travaux, la méthode que nous utiliserons est une extension de SpaceCORR aux images hyperspectrales mais dans un contexte différent de celui étudié par S. Karoui *et al.* Nous détaillerons la version de l'algorithme que nous utilisons dans la Section 3.2.1.

1.4.4 Inférence bayésienne

Une dernière grande classe de méthodes utilisées pour la SAS regroupe les méthodes basées sur l'inférence bayésienne. L'idée générale de ces méthodes est l'ajout de connaissances *a priori* sur les sources, les coefficients de mélanges et/ou le bruit afin de contraindre davantage le modèle linéaire et donc de réduire l'ensemble des solutions admissibles. En considérant les sources S et les coefficients de mélange A comme des réalisations de variables aléatoires indépendantes, les *a priori* dont on dispose permettent d'attribuer des densités de probabilités $p(S)$ et $p(A)$ respectivement à S et A . A partir de la vraisemblance des observations $p(X|A, S)$ et de la règle de Bayes, la loi *a posteriori* des données s'exprime suivant :

$$p(A, S|X) = \frac{p(X|A, S)p(A, S)}{p(X)}, \quad (1.49)$$

où $p(X)$ est la densité des observations, considérée comme un terme de normalisation. De plus, l'indépendance de A et S permet d'obtenir l'expression de la loi *a posteriori* suivante :

$$p(A, S|X) \propto p(X|A, S)p(A)p(S). \quad (1.50)$$

Cette loi *a posteriori* permet ensuite de définir un estimateur des sources S et des coefficients de mélange A dont le plus courant est le MAP (pour *Maximum a posteriori*). Enfin des algorithmes d'optimisation tels que EM (pour *Expectation Maximisation* en anglais) ou encore une modélisation MCMC (pour *Markov Chain Monte Carlo* en anglais) permettent d'obtenir les estimations \hat{S} et \hat{A} des sources et des coefficients de mélange.

Pour plus de détails sur ce type d'approche en SAS, le lecteur pourra consulter le Chapitre 12 de [37] ainsi que les références qui y sont citées. D'autres exemples de travaux seront

mentionnés dans la Section 2.5.2 portant sur l'état de l'art des méthodes utilisées en astrophysique [34, 35, 83, 85, 109, 129]. Dans notre contexte, nous ne souhaitons pas introduire d'information supplémentaire dans le modèle de mélange linéaire $X = AS$, afin de conserver un modèle simple permettant une interprétation physique des résultats aisée. Nous n'utilisons donc pas cette classe de méthodes.

1.4.5 Méthodes géométriques

Les méthodes géométriques sont une classe de méthodes de SAS basées sur la représentation géométrique des données observées. Sous des hypothèses plus ou moins restrictives de non négativité et de parcimonie, la structure géométrique que prend les données peut être exploitée afin de réaliser la séparation des sources. Les méthodes géométriques sont particulièrement étudiées dans le contexte de démélange d'image hyperspectrale en observation de la Terre, dû à la géométrie particulière du problème induite par un mélange linéaire contraint. Nous détaillerons ce point et présenterons les méthodes géométriques utilisées en télédétection dans le chapitre suivant (Section 2.4.2). Dans cette section-ci, nous nous focaliserons sur les méthodes de la littérature applicables directement sur les données issues d'un mélange linéaire standard Eq. (1.16).

1.4.5.1 Principe général

L'hypothèse de départ est, comme pour la NMF, que les observations X , les coefficients de mélange A et les sources S sont non négatifs (i.e. $X \in \mathbb{R}_+^{M \times N}$, $A \in \mathbb{R}_+^{M \times L}$ et $S \in \mathbb{R}_+^{L \times N}$). En considérant chaque colonne de la matrice des observations comme un élément d'un \mathbb{R}^M espace vectoriel, l'ensemble des données observées forme un ensemble de vecteurs localisé dans l'orthant positif :

$$\{x(., n)\} \subset \mathbb{R}_+^M \quad \forall n \in \{1, \dots, N\}, \quad (1.51)$$

où $x(., n)$ est la $n^{\text{ième}}$ colonne de X (on la notera x_n par la suite pour alléger la notation). Chaque vecteur observé x_n est issu d'une combinaison linéaire non négative des signaux sources :

$$x_n = As_n \quad A \in \mathbb{R}_+^{M \times L}, s_n \in \mathbb{R}_+^L \quad n \in \{1, \dots, N\}, \quad (1.52)$$

où le vecteur s_n est la $n^{\text{ième}}$ colonne de S . En supposant que A est de rang de colonne plein, l'ensemble de toutes les combinaisons linéaires non négatives des colonnes de A :

$$\mathcal{C}(A) = \{c \mid c = Av, v \in \mathbb{R}_+^L\}, \quad (1.53)$$

forme un cône simplicial dans \mathbb{R}_+^M . Les vecteurs colinéaires aux colonnes de A (notées a_ℓ), sont les ℓ arêtes \mathcal{E}_ℓ du cône simplicial $\mathcal{C}(A)$:

$$\mathcal{E}_\ell = \{c \mid c = \alpha a_\ell, \alpha \in \mathbb{R}_+\}. \quad (1.54)$$

De même, on définit les ℓ facettes \mathcal{F}_ℓ du cône simplicial $\mathcal{C}(A)$ comme étant les sous-ensembles suivant :

$$\mathcal{F}_\ell = \{c \mid c = A_{\setminus a_\ell} v, v \in \mathbb{R}_+^{L-1}\}, \quad (1.55)$$

où $A_{\setminus a_\ell}$ est la matrice A privée de sa $\ell^{ième}$ colonne. On note qu'une facette d'un cône simplicial de dimension L est un cône simplicial de dimension $L - 1$.

Le principe des méthodes géométriques est d'identifier le cône simplicial $\mathcal{C}(X)$ généré par les observations. Sous certaines conditions de parcimonie, les cônes simpliciaux $\mathcal{C}(X)$ et $\mathcal{C}(A)$ sont confondus. Ainsi, identifier l'enveloppe convexe englobant les observations X permet d'identifier la matrice de mélange A . On trouve dans la littérature deux approches distinctes permettant cette identification : la matrice A est identifiée soit en recherchant les arêtes, soit en recherchant les facettes du cône simplicial pour en déduire les arêtes. Ces deux stratégies sont caractérisées par des contraintes de parcimonie différentes sur la matrice des sources S .

Une dernière approche géométrique, distincte des deux citées précédemment, est à mentionner. Le principe décrit jusqu'ici concerne l'utilisation de la géométrie des données, sous certaines contraintes de parcimonie, pour résoudre le problème de SAS. Une méthode à part entière est basée sur l'exploitation de la géométrie de la matrice de corrélation des données. Bien que le principe d'identification du cône simplicial reste proche des méthodes plus classiques basées sur la géométrie des données, le cône simplicial en lui-même ne représente pas la même information que dans les méthodes précédemment évoquées.

Dans la suite de cette section, nous préciserons ces trois approches géométriques distinctes de SAS en présentant trois méthodes associées de la littérature.

1.4.5.2 Méthodes d'identification par les sommets

La première approche pour identifier le cône simplicial $\mathcal{C}(A)$ est basée sur la recherche de ses ℓ arêtes \mathcal{E}_ℓ directement à partir des observations. Ce type de méthode nécessite l'hypothèse de parcimonie sur la matrice des sources S suivante :

Hypothèse 5 : Pour chaque source, il existe au moins un indice d'échantillons n des observations (*i.e.* une colonne de X) pour lequel une unique source est active (*i.e.* la $n^{ième}$ colonne de S a une seule valeur non nulle).

En d'autres termes, il existe pour chaque source au moins un vecteur observé mono-source. Pour illustrer cette hypothèse, supposons que l'échantillon d'indice n_0 contient uniquement la source d'indice ℓ_0 . A partir de l'expression d'un mélange linéaire non négatif, Eq. (1.52), la colonne n_0 de X vérifie la relation $x_{n_0} = A s_{\ell_0 n_0}$, ce qui est équivalent à :

$$x_{n_0} = a_{\ell_0} s_{\ell_0 n_0}, \quad (1.56)$$

où le scalaire $s_{\ell_0 n_0}$ correspond à la $\ell_0^{ième}$ entrée de la $n_0^{ième}$ colonne de S . On reconnaît alors l'expression d'une arête (Eq. (1.54)) du cône simplicial engendré par A . Si l'*Hypothèse 5* est vérifiée, le cône simplicial engendré par les données observées est confondu avec le cône simplicial engendré par A . Cette situation est schématisée sur la Figure 1.9.

On trouve dans la littérature deux méthodes utilisant l'identification d'un cône simplicial par les sommets. Notons que ces méthodes ont été développées dans un contexte d'imagerie hyperspectrale en observation de la Terre mais qu'elles sont applicables au modèle de mélange linéaire non négatif non contraint.

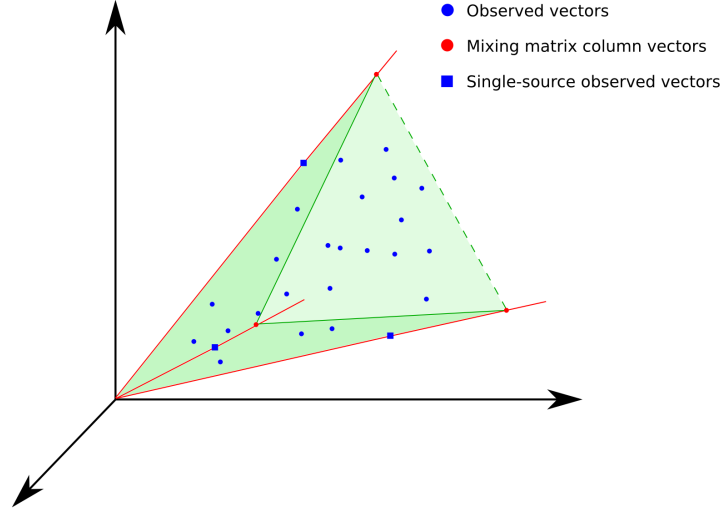


FIGURE 1.9 – Représentation du cône simplicial englobant les données issues d’un mélange de 3 sources en 3 dimensions. Les cônes simpliciaux générés par A et X sont confondus si l’*Hypothèse 5* est vérifiée.

Exploitation de la géométrie induite par les données La méthode SMACC (pour *Sequential Maximum Angle Convex Cone* en anglais) [64] propose un algorithme séquentiel pour identifier le cône simplicial $\mathcal{C}(A)$ englobant les observations. En premier lieu, le cône simplicial est défini à parti d’une unique colonne de la matrice des observations. A chaque itération, la dimension du cône simplicial estimé est incrémentée. Les sources estimées sont générées simultanément et mises à jour à chaque itération de l’algorithme. L’identification d’une nouvelle arête du cône simplicial est basée sur l’étude de l’angle formé par les observations avec le cône simplicial existant. Le vecteur observé formant un angle maximum est retenu comme nouvelle colonne de la matrice de mélange A et augmente ainsi la dimension du cône simplicial de 1.

Le procédé utilisé par les auteurs pour définir les angles formés par les observations avec le cône simplicial repose sur la méthode de “Gram-Schmidt” (algorithme classiquement utilisé en algèbre pour identifier une base orthogonale à partir d’une famille libre de vecteurs). Pour les besoins de la méthode, l’algorithme de Gram-Schmidt est modifié de manière à permettre des projections obliques afin de garantir la non négativité des arêtes du cône simplicial estimées.

La procédure prend fin lorsque tous les vecteurs observés sont contenus dans le cône simplicial estimé.

Exploitation de la géométrie induite par les statistiques des données La méthode CCA (pour *Convex Cone Analysis* en anglais) [73] est basée sur la décomposition en éléments propres de la matrice de corrélation des échantillons de la matrice des observations. En supposant le nombre de sources L connu, les L vecteurs propres associés aux L plus grandes valeurs propres de la matrice de corrélation sont utilisés comme base de décomposition. L’ensemble des combinaisons linéaires des éléments de cette base dont le résultat est non

négligé forme un cône convexe.

L'objectif de la méthode est d'identifier les arêtes de ce cône convexe. Les arêtes du cône convexe sont les points extrêmes contenant $L - 1$ valeurs nulles, les autres étant non négatives.

La matrice générant ce cône convexe (i.e. la matrice formée par les arêtes précédemment identifiées) est ensuite utilisée pour construire un opérateur d'inversion permettant de résoudre le problème de séparation.

1.4.5.3 Méthodes d'identification par les facettes

La seconde approche permettant d'identifier le cône simplicial $\mathcal{C}(A)$ est basée sur la recherche de ses ℓ facettes \mathcal{F}_ℓ . Ce type de méthode nécessite également une hypothèse de parcimonie sur la matrice des sources S , afin de garantir que chaque facette est identifiable uniquement à partir des observations :

Hypothèse 6 : Pour chaque source, il existe au moins $L - 1$ indices d'échantillons des observations (i.e. $L - 1$ colonnes de X) pour lesquels une unique source est nulle, les autres étant actives (i.e. les $L - 1$ colonnes de S considérées ont le même élément nul).

En d'autres termes, chaque facette du cône simplicial engendré par X contient au moins $L - 1$ vecteurs observés. Ainsi le cône simplicial engendré par les données est confondu avec le cône simplicial engendré par A .

La méthode SCSA (pour *Simplicial Cone Shrinking Algorithm en anglais*) [114], proposée dans un contexte d'imagerie médicale, est une approche reposant sur cette hypothèse et permettant de chercher le cône simplicial d'ouverture minimale englobant toutes les données observées, l'ouverture du cône simplicial étant contrainte par ces facettes.

Le principe de la méthode consiste, à partir d'un cône initial contenant la totalité des observations, à construire itérativement une suite de cônes simpliciaux inclus les uns dans les autres et contenant l'ensemble des observations. L'ouverture du cône courant est inférieure à celle du cône précédent. Le cône courant est obtenu par construction géométrique en modifiant une à une les arêtes du cône précédent. L'algorithme s'arrête lorsque l'ouverture du cône estimé ne peut pas être réduite davantage.

La méthode permet ainsi d'obtenir une estimation de la matrice de mélange A par une approche de minimisation globale du critère d'ouverture contraint par la présence d'observations sur les facettes du cône simplicial engendré par A . Cependant le critère utilisé n'étant pas convexe, la recherche de l'ouverture minimale peut donner une solution non optimale, requérant l'utilisation d'une matrice de rotation adéquate pour débloquer l'algorithme et poursuivre la minimisation.

Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons présenté les principes de la SAS ainsi qu'un panorama des différentes classes de méthodes existantes dans le cas d'un mélange linéaire instantané. Le choix d'une classe de méthodes dépend de la nature des données et des hypothèses que l'on peut formuler sur celles-ci. Nous avons esquissé quelques propriétés relatives aux données utilisées dans le cadre de nos travaux (*e.g.* la corrélation des sources, la non négativité des données ou encore la parcimonie). Nous détaillerons plus précisément la nature de nos données dans le chapitre suivant et pourrons ainsi conclure sur nos choix de méthodes pour résoudre notre problème de SAS en astrophysique.

Chapitre 2

L'imagerie hyperspectrale

Sommaire

Introduction	42
2.1 Généralités	42
2.2 Modèle physique de mélange	44
2.2.1 En observation de la Terre	45
2.2.2 En astrophysique	49
2.3 Modèle du cube	51
2.3.1 Modèle spectral	52
2.3.2 Modèle spatial	52
2.3.3 Choix du modèle	53
2.4 Méthodes de SAS en observation de la Terre	53
2.4.1 Panorama des méthodes standard	54
2.4.1.1 Analyse en composantes indépendantes	54
2.4.1.2 Factorisation en matrices non négatives	54
2.4.1.3 Analyse en composantes parcimonieuses	54
2.4.2 Méthodes géométriques	56
2.4.2.1 Méthodes avec pixels purs	57
2.4.2.2 Méthodes à volume minimal	58
2.5 État de l'art de la SAS en astrophysique	59
2.5.1 Analyse en composantes indépendantes	59
2.5.2 Méthodes bayésiennes	60
2.5.3 Factorisation en matrices non négatives	60
2.5.4 Analyse en composantes parcimonieuses	61
2.6 Étude de nos données et choix méthodologiques	61
2.6.1 Caractéristiques des images hyperspectrales	62
2.6.2 Choix méthodologiques	63
2.6.2.1 Classe de méthodes	64
2.6.2.2 Modèle de mélange	65
2.6.3 Positionnement de nos travaux	65
Conclusion	66

Introduction

Dans ce chapitre, nous aborderons le principe de l'imagerie hyperspectrale et la problématique de SAS que soulèvent de telles données. Nous nous restreindrons dans le cadre de ce manuscrit, aux cas de l'observation de la Terre et de l'astrophysique. Nous évoquerons dans un premier temps, les processus de formation des images pour ces deux applications, puis nous détaillerons les deux modèles de mélange linéaires spécifiques à ce type de données. Dans un second temps, nous réaliserons l'état de l'art des méthodes de SAS employées en observation de la Terre et en astrophysique. Pour finir, nous décrirons les données sur lesquelles nous travaillerons tout au long de ce manuscrit et conclurons ainsi sur nos choix méthodologiques.

2.1 Généralités

L'imagerie hyperspectrale consiste à acquérir simultanément dans différentes longueurs d'onde la lumière émise ou réfléchi par les objets composant la scène observée. Ainsi, pour chaque élément du plan spatial (*i.e.* pixel) une mesure du spectre de puissance électromagnétique est effectuée. Les données collectées par ce type d'imageur peuvent être vues comme une fonction de trois variables : deux variables spatiales donnant la position du pixel dans l'image, et une variable spectrale donnant la longueur d'onde de la lumière. Les images hyperspectrales sont donc des données agencées en cube (on parle couramment de cube de données ou cube hyperspectral), pouvant être appréhendées de deux manières. Elles peuvent être vues comme un ensemble d'images de la puissance du rayonnement électromagnétique émis ou réfléchi autour d'une longueur d'onde donnée, avec donc une image par bande étroite de longueurs d'onde (on parle alors de bande spectrale). Elles peuvent aussi être vues comme un ensemble de spectres de puissance électromagnétique, avec un spectre pour chaque position dans l'image.

Nous illustrons cette définition en distinguant les images hyperspectrales des images monochromes et multispectrales (nous considérons ici qu'une image couleur standard est une image multispectrale acquise avec trois bandes spectrales : rouge, vert et bleu). Sur la Figure 2.1 on observe les caractéristiques suivantes :

- Les images monochromes sont acquises suivant une unique bande spectrale (couvrant une large gamme $\Delta\lambda$ de longueurs d'onde) et fournissent l'intensité lumineuse mesurée pour chaque pixel de l'image.
- Les images multispectrales sont acquises suivant 3, ou au plus, 10 bandes spectrales. La largeur $\delta\lambda$ des bandes spectrales peut varier d'un bande à l'autre et elles sont souvent irrégulièrement espacées.
- Les images hyperspectrales sont acquises suivant plusieurs centaines de bandes spectrales. Les bandes spectrales sont fines, de même largeur et régulièrement espacées permettant d'obtenir un spectre quasi continu pour chaque pixel.

Les images hyperspectrales sont acquises par des capteurs de plus en plus performants. Trois caractéristiques principales permettent de quantifier les performances de ces capteurs, et donc d'évaluer les capacités des données obtenues à restituer l'information du milieu observé :

- *La résolution spatiale* : cette caractéristique permet, comme pour les images conventionnelles, d'évaluer la finesse des détails d'une image. Elle désigne l'aptitude du cap-

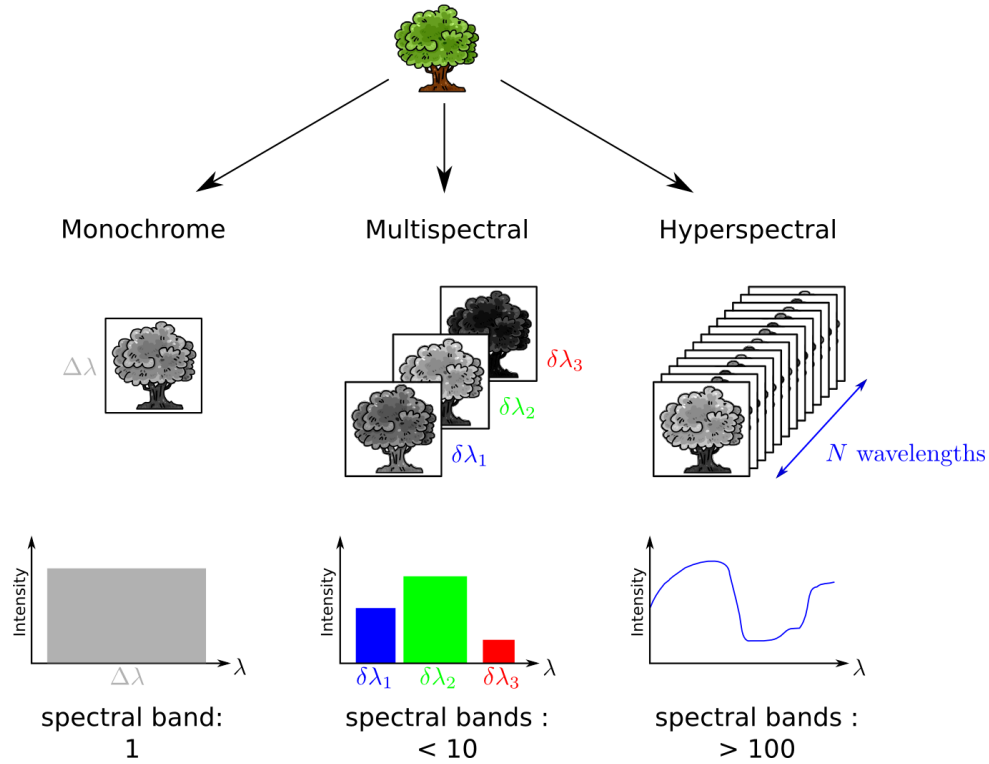


FIGURE 2.1 – De l’imagerie monochrome à l’imagerie hyperspectrale. Figure inspirée de la Figure 1.2 page 10 de la thèse de N. Gorretta-Monteiro [62].

teur à distinguer de petits objets adjacents. Elle est communément exprimée en terme de surface couverte par un pixel du capteur ou en terme d’angle d’ouverture, notamment en astronomie.

- *La résolution spectrale* : cette caractéristique permet d’évaluer la finesse du spectre obtenu pour chaque pixel. Elle désigne l’aptitude du capteur à distinguer deux longueurs d’onde proches de la lumière qui lui parvient. Elle quantifie la distance entre deux bandes spectrales adjacentes.
- *La résolution radiométrique* : cette caractéristique permet d’évaluer la finesse de l’intensité mesurée en chaque point du spectre. Elle désigne l’aptitude du capteur à distinguer deux intensités lumineuses proches. Cette grandeur est directement liée au pas de quantification associé à l’électronique du capteur et définit le nombre maximum d’intensités différentes enregistrées par pixel. En astrophysique, on parle de sensibilité.

Le principe de l’imagerie hyperspectrale est basé sur le fait que chaque objet observé émet ou reflète des ondes électromagnétiques à des longueurs d’onde spécifiques à sa composition moléculaire. Ainsi chaque spectre observé associé à chaque pixel du cube possède des propriétés d’émission, d’absorption, de réflexion et/ou de transmission du ou des matériaux présents dans ce pixel à chaque longueur d’onde acquise par l’instrument. Les images hyperspectrales sont donc une source importante d’informations caractérisant la scène observée. Elles permettent au travers de méthodes d’analyse adéquates de répondre à certaines ques-

tions telles que “combien de matériaux sont présents dans la scène observée?”, “dans quelle proportion?” ou encore “comment sont-ils répartis dans la scène?”. La richesse des informations contenues par les images hyperspectrales permet le développement de nombreuses applications. On les retrouve dans de nombreux domaines tels que : l’imagerie médicale, l’agroalimentaire, la chimie, l’astrophysique, la télédétection avec en particulier la géologie, l’urbanisme, la défense, l’écologie, l’agriculture... Notons que le terme de télédétection au sens général désigne l’acquisition d’informations sur un objet ou un phénomène, par l’intermédiaire d’un instrument de mesure situé à distance. Ainsi, suivant cette définition, l’astronomie fait partie de la télédétection. Cependant, communément, le terme de télédétection est réservé à l’observation de la Terre.

En imagerie hyperspectrale, les spectres observés associés à chaque pixel ne sont généralement pas issus d’un unique matériau. Ainsi le spectre d’un pixel est le résultat du mélange des spectres de tous les constituants purs présents dans le pixel. Les phénomènes physiques à l’origine de ces mélanges ainsi que leurs modélisations dépendent des applications (nous détaillerons ce point dans la suite de cette section pour deux applications spécifiques). Ce “mélange spectral” conduit à de nombreux problèmes d’analyse de l’information contenue dans le cube de données comme par exemple, comment classer les pixels d’une image suivant les matériaux constituant la scène observée, comment obtenir la composition et la concentration minéralogique d’un sol si chaque spectre observé est constitué du mélange des spectres des matériaux purs. C’est dans ce contexte que les méthodes de SAS interviennent et constituent souvent une étape préalable nécessaire à l’analyse des données hyperspectrales.

Les méthodes de SAS en télédétection sont un domaine largement étudié dans la littérature et de nombreuses méthodes spécifiques ont vu le jour dans ce contexte. Bien que les données et le modèle physique de mélange diffèrent légèrement de nos applications astrophysiques, nous en présentons ici le principe général pour plusieurs raisons : certaines de nos méthodes sont déduites de méthodes employées en observation de la Terre et les méthodes que nous proposons sont applicables à la télédétection (sous réserve de quelques modifications mineures).

Par ailleurs, un dernier domaine d’application est à mentionner pour la SAS appliquée à l’imagerie hyperspectrale. Il s’agit de la planétologie, domaine appartenant à l’astrophysique mais employant des modèles et des méthodes proches de ceux utilisés en observation de la Terre. Nous ne détaillerons pas cet aspect de l’imagerie hyperspectrale, mais nous mentionnerons quelques exemples de travaux dans la Section 2.5.

Dans la suite de ce chapitre, nous détaillerons les phénomènes physiques conduisant au mélange des données puis les différents modèles de mélange utilisés en SAS pour extraire l’information des données hyperspectrales dans le cadre de la télédétection et de l’astrophysique.

2.2 Modèle physique de mélange

Les capteurs hyperspectraux mesurent l’énergie transportée par les photons à une longueur d’onde λ donnée, ou plus précisément sur un petit intervalle de longueurs d’onde correspondant à la sensibilité du capteur. Plusieurs grandeurs physiques permettent de décrire

cette énergie comme par exemple, l'éclairement (*irradiance* en anglais) exprimé en $W.m^{-2}$, décrivant la puissance du rayonnement reçue par une surface ou encore la luminance (*radiance* en anglais) exprimée en $W.m^{-2}.sr^{-1}$, décrivant la puissance émise par une surface.

Pour nos besoins et par souci de simplicité, nous utiliserons pour quantifier la radiation électromagnétique émise ou reçue par un objet la radiance spectrale notée $\phi(\lambda)$, exprimée en $W.m^{-2}.sr^{-1}.Hz^{-1}$ (*i.e.* la puissance émise ou reçue par unité de surface, par angle solide et par longueur d'onde). Notons que cette grandeur dépend également de l'orientation de la surface et, dans le cas d'une surface réfléchissant un rayonnement, de la nature du matériau et des angles d'incidence et de réflexion. La radiance spectrale nous permet d'homogénéiser le vocabulaire utilisé par les différentes communautés de la télédétection et de l'astrophysique. Notons d'ailleurs que les astronomes utilisent le terme d'intensité spécifique à la place de radiance spectrale. Pour plus de détails sur l'imagerie en observation de la Terre, le lecteur pourra consulter [57] et plus particulièrement le Chapitre 3 portant sur la radiométrie en télédétection. Pour les notions de transfert radiatif en astrophysique, le lecteur pourra consulter [29].

Les mécanismes de formation des images et la nature des objets observés sont différents en télédétection et en astrophysique. Nous allons donc distinguer ces deux cas qui conduisent à un modèle de données légèrement différent.

2.2.1 En observation de la Terre

Le processus de formation d'une image hyperspectrale en télédétection peut être résumé comme suit. Le rayonnement solaire, constituant la source principale d'éclairage, illumine la surface imagée au niveau du sol. Le rayonnement électromagnétique émis par notre étoile traverse l'atmosphère terrestre et interagit avec elle par des phénomènes d'absorption et de diffusion modifiant ainsi sa distribution spectrale. Ce rayonnement interagit ensuite avec les matériaux présents au niveau du sol qui vont l'absorber, le diffuser et/ou le réfléchir, ceci en fonction de la longueur d'onde et de la nature des matériaux. Le rayonnement réfléchi retraverse l'atmosphère, subissant ainsi de nouvelles modifications pour enfin être capté par l'instrument. Le spectre de radiance mesuré par l'instrument provient donc du spectre du rayonnement solaire modifié par deux traversés de l'atmosphère et par sa réflexion sur les matériaux au sol.

La réflectance d'un matériau notée $\varphi(\lambda)$ est une grandeur physique mesurant la capacité d'un matériau à réfléchir un rayonnement incident. Elle est définie comme le rapport entre la radiance incidente et la radiance réfléchie et donne ainsi la proportion de rayonnement réfléchi par le matériau. Cette grandeur sans unité dépend de la longueur d'onde et de l'orientation de la surface.

La réflectance, constituant le signal d'intérêt, est obtenue en corrigeant les effets des deux traversées de l'atmosphère et en normalisant le spectre de radiance capté par le spectre de radiance solaire. Ainsi chaque pixel d'une image hyperspectrale en télédétection correspond à un vecteur de mesure de la réflectance caractéristique des matériaux présents au sol. Nous illustrons ce propos sur la Figure 2.2. La figure présente une version schématique d'une image hyperspectrale acquise par un satellite observant la surface de la Terre. On remarque que

chaque élément constituant la scène (eau, sol, végétation...) possède une signature spectrale propre permettant de l'identifier.

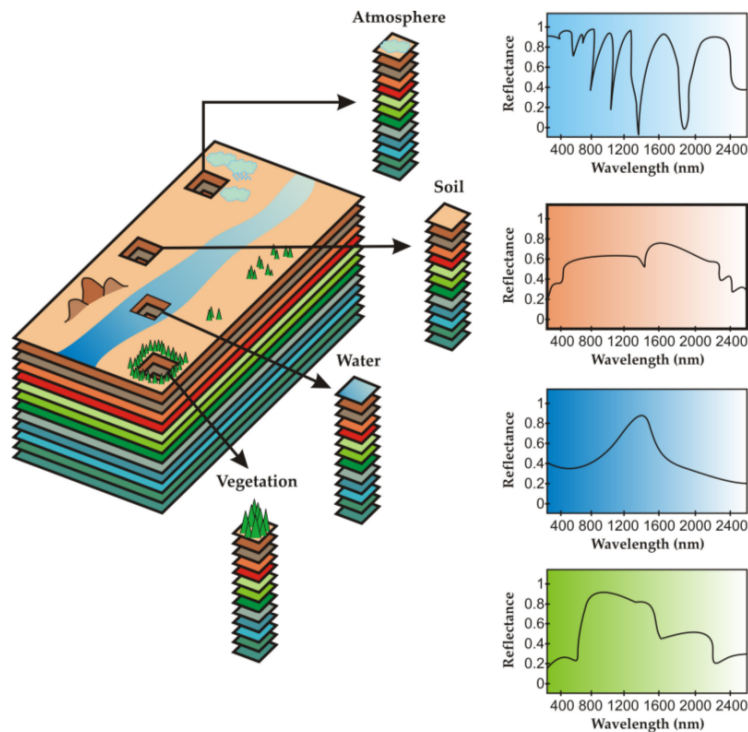


FIGURE 2.2 – Illustration d'un cube hyperspectral en observation de la Terre. A chaque pixel du cube correspond un spectre de réflectance. Schéma issu de [19].

La surface couverte par un pixel correspond à une zone spatiale locale mais dont l'étendue est non négligeable. Cette zone ne coïncide généralement pas avec la distribution spatiale des matériaux à la surface du sol. Ainsi un pixel couvre généralement une surface constituée de plusieurs matériaux purs. Les pixels mélangés sont parfois appelés mixels en opposition aux pixels non mélangés appelés pixels purs. Les pixels possèdent donc une signature spectrale ne correspondant à aucun des matériaux purs présents dans la scène observée. Ce phénomène de mélange est principalement dû à la résolution spatiale de l'instrument (de l'ordre de la dizaine de mètres généralement, voire du mètre pour les meilleurs instruments actuels en imagerie satellitaire (Pléiades) [57]).

Le comportement spectral d'un pixel est issu de la composition des réflectances des différents matériaux purs le constituant. Le modèle de données le plus courant pour représenter cette composition est un modèle de mélange linéaire. Ce modèle est réaliste lorsque la surface imagée est relativement plane, uniformément éclairée et les matériaux purs sont agencés de manière à constituer un pavage grossier (Fig. 2.3). Cependant ce modèle devient inadapté pour un milieu urbain, par exemple, où des réflexions multiples sur différents matériaux peuvent apparaître. On préférera dans ce cas un modèle linéaire quadratique (voir par exemple les travaux [100, 101, 103] ainsi que les références qui y sont citées). Une autre limite au

modèle linéaire apparaît lorsqu'un matériau supposé pur n'est pas homogène et présente des propriétés de mélange au niveau microscopique. On parle alors de mélange intime. De nouveau, ce cas est pris en compte par des approches non-linéaires. Un résumé des approches non-linéaires en télédétection est disponible dans [53].

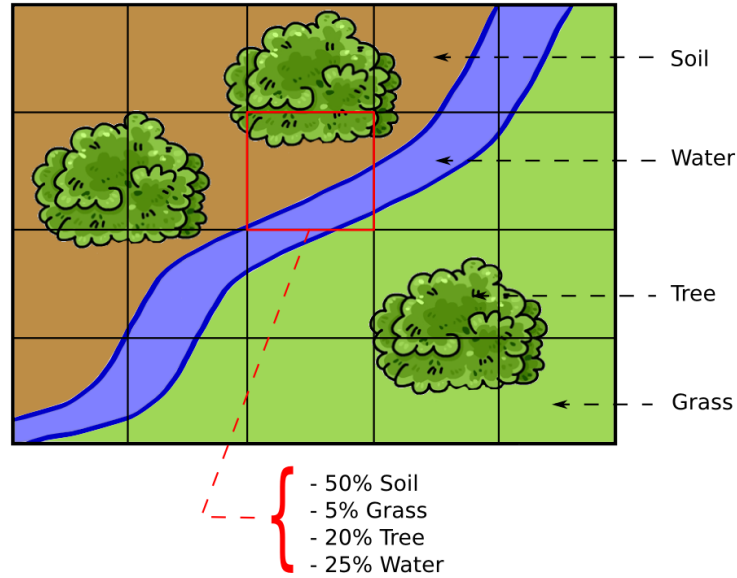


FIGURE 2.3 – Schéma d'une image contenant des pixels mélangés en observation de la Terre.

Dans le cas d'un mélange linéaire, le spectre de réflectance observé au niveau d'un pixel est représenté par la combinaison linéaire des différents spectres de réflectance des matériaux purs présents dans le pixel. La pondération affectée à chaque spectre pur représente la proportion du matériau associé dans le pixel (Figure 2.4). Le passage de la radiance spectrale mesurée à la réflectance observée (i.e. la normalisation du rayonnement réfléchi par le rayonnement incident) introduit une contrainte supplémentaire sur les pondérations affectées à chaque spectre pur, que nous allons détailler ci-après.

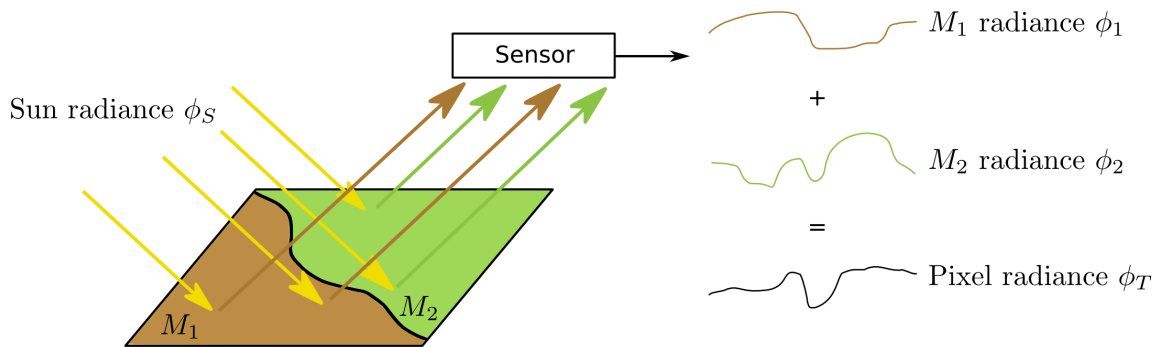


FIGURE 2.4 – Modélisation du mélange au niveau d'un pixel en télédétection.

Pour cette démonstration, nous négligerons les effets de l'atmosphère et supposerons que la scène est illuminée uniformément. Reprenons l'exemple d'un pixel contenant deux matériaux notés M_1 et M_2 , comme illustré sur la Figure 2.4. La surface occupée au sein du pixel par le matériau M_1 (resp. M_2) est notée S_{M_1} (resp. S_{M_2}). On note $\phi_{M_1}(\lambda)$ et $\phi_{M_2}(\lambda)$ les radiances spectrales réfléchies par les matériaux M_1 et M_2 . La radiance spectrale totale réfléchie est donc $\phi_T(\lambda) = \phi_{M_1}(\lambda) + \phi_{M_2}(\lambda)$. La radiance spectrale solaire incidente sur le pixel est notée $\phi_S(\lambda)$. D'après la définition de la réflectance, la réflectance total $\varphi_T(\lambda)$ du pixel est donnée par :

$$\varphi_T(\lambda) = \frac{\phi_{M_1}(\lambda) + \phi_{M_2}(\lambda)}{\phi_S(\lambda)}. \quad (2.1)$$

Cependant, dans cette relation la notion de surface occupée par les deux matériaux est cachée. On note $\phi'_{M_1}(\lambda)$, $\phi'_{M_2}(\lambda)$ et $\phi'_S(\lambda)$ la radiance spectrale réfléchie par surface unitaire pour le matériau M_1 , M_2 et pour la radiance spectrale solaire incidente, respectivement. On a donc :

$$\begin{aligned} \phi_{M_1}(\lambda) &= S_{M_1} \phi'_{M_1}(\lambda), \\ \phi_{M_2}(\lambda) &= S_{M_2} \phi'_{M_2}(\lambda), \\ \phi_S(\lambda) &= (S_{M_1} + S_{M_2}) \phi'_S(\lambda). \end{aligned} \quad (2.2)$$

On en déduit alors :

$$\varphi_T(\lambda) = \frac{S_{M_1} \phi'_{M_1}(\lambda) + S_{M_2} \phi'_{M_2}(\lambda)}{(S_{M_1} + S_{M_2}) \phi'_S(\lambda)}. \quad (2.3)$$

Ainsi les contributions des réflectances de chaque matériau dans la réflectance totale est donnée par :

$$\varphi_T(\lambda) = \frac{S_{M_1}}{S_{M_1} + S_{M_2}} \varphi_{M_1}(\lambda) + \frac{S_{M_2}}{S_{M_1} + S_{M_2}} \varphi_{M_2}(\lambda), \quad (2.4)$$

où $\varphi_{M_1}(\lambda) = \frac{\phi'_{M_1}(\lambda)}{\phi'_S(\lambda)}$ et $\varphi_{M_2}(\lambda) = \frac{\phi'_{M_2}(\lambda)}{\phi'_S(\lambda)}$ sont respectivement les réflectances des matériaux M_1 et M_2 . Le coefficient de pondération associé à chaque réflectance est donc la proportion de surface dans le pixel occupée par le matériau considéré. On en déduit aisément que la somme des pondérations associées à chaque matériau vaut 1. La généralisation de la relation Eq. (2.4) au cas du pixel contenant L matériaux donne :

$$\varphi_T(\lambda) = \sum_{\ell=1}^L \frac{S_{M_\ell}}{S_T} \varphi_{M_\ell}(\lambda), \quad (2.5)$$

où S_T est la surface totale couverte par le pixel : $S_T = \sum_{\ell=1}^L S_{M_\ell}$.

Par ailleurs, chaque terme de l'expression de la réflectance totale d'un pixel (Eq. (2.5)) est non négatif. En effet, $\frac{S_{M_\ell}}{S_T}$ est la fraction de la surface du pixel occupée par le $\ell^{ième}$ matériau, elle est donc positive et comprise entre 0 et 1. La réflectance $\varphi_{M_\ell}(\lambda)$ du $\ell^{ième}$ matériau est le rapport de deux radiances spectrales (*i.e.* de deux puissances), elle est donc positive et comprise entre 0 et 1.

Par identification avec le modèle de mélange linéaire Eq. (1.15), les réflectances des matériaux constituent les sources et leurs proportions associées (communément appelées

abondances) représentent les coefficients du mélange. En utilisant les notations usuelles en SAS, le modèle de mélange d'un spectre associé à un pixel en observation de la Terre est donné par :

$$\left\{ \begin{array}{l} x(\lambda) = \sum_{\ell=1}^L a_{\ell} s_{\ell}(\lambda) \\ \sum_{\ell=1}^L a_{\ell} = 1 \\ a_{\ell} \geq 0 \quad \forall \ell \in \{1, \dots, L\} \\ s_{\ell}(\lambda) \geq 0 \quad \forall \ell \in \{1, \dots, L\} \end{array} \right. \quad (2.6)$$

où $x(\lambda) = \varphi_T(\lambda)$ est le signal observé correspondant au spectre de réflectance totale du pixel, $a_{\ell} = \frac{S_{M_{\ell}}}{S_T}$ est le coefficient de mélange correspondant à l'abondance du matériau M_{ℓ} dans le pixel et $s_{\ell}(\lambda) = \varphi_{M_{\ell}}(\lambda)$ est le spectre de réflectance du matériau M_{ℓ} . Par la suite, on utilisera pour ce modèle la notation d'indice spectral définit précédemment, *i.e.* la notation λ sera remplacée par la notation générique n .

Pour conclure, on constate que le modèle de mélange linéaire des réflectances au niveau d'un pixel est contraint par la non négativité et par la somme à 1 des abondances des matériaux. La contrainte de non négativité provient de la nature des signaux observés et la contrainte de somme à 1 provient de la normalisation des radiances spectrales réfléchies par la radiance spectrale incidente uniforme. Nous verrons dans la Section 2.4.2 que l'ajout de la contrainte de somme à 1 au modèle de mélange linéaire non négatif induit une représentation géométrique différente de celle exposée dans la Section 1.4.5. Les propriétés géométriques induites par le modèle Eq. (2.6) sont à l'origine de nombreuses méthodes propres à la télédétection décrites dans la Section 2.4.2.

2.2.2 En astrophysique

Les données hyperspectrales sur lesquelles nous travaillons sont issues de l'observation de régions de formation stellaire par les télescopes spatiaux Spitzer et Herschel. Les nébuleuses étudiées sont caractérisées par la présence de jeunes étoiles massives entourées d'un nuage de matière composé de gaz et de poussières. Ce nuage a la particularité d'absorber la lumière émise par les étoiles dans l'ultraviolet (UV) pour en réémettre la majeure partie dans l'infrarouge (IR). Sous l'effet d'un tel rayonnement, on observe une stratification du nuage de matière où chaque couche est constituée de molécules de gaz et de poussières spécifiques.

Pour de telles observations, la nature du rayonnement électromagnétique capté par l'instrument est un rayonnement d'émission, dépendant de la composition du nuage de matière. Pour quantifier le rayonnement électromagnétique émis, on utilise la radiance spectrale notée $\phi(\lambda)$.

Ainsi, chaque pixel du cube hyperspectral correspond à un vecteur de mesure de la radiance spectrale émise par une portion de la nébuleuse observées. Chaque pixel de l'image peut être associé à une ligne de visée spécifique. Cette situation est schématisée sur la Figure 2.5. Dans cet exemple, le nuage de gaz observé est décomposé en trois couches sous l'effet du

rayonnement UV. Les quatre pixels du capteur schématisés par les lignes de visée notées de *a* à *d* sont associés aux spectres d'émission du nuage le long de ces mêmes lignes de visée.

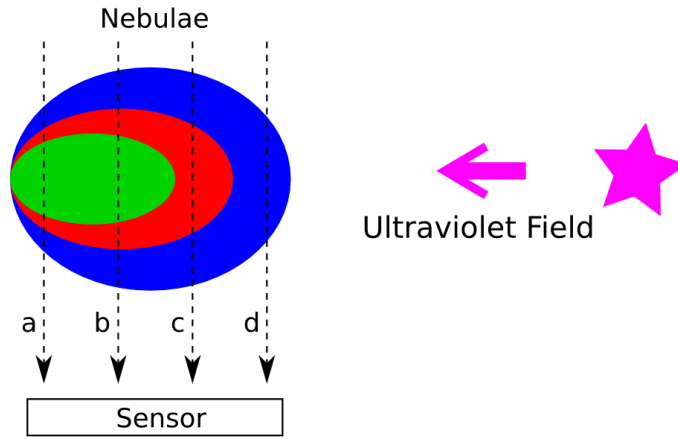


FIGURE 2.5 – Illustration des lignes de visée associées à chaque pixel pour une région de photodissociation. On observe une stratification du nuage de gaz sous l'effet du rayonnement UV provenant de l'étoile.

Afin d'aboutir à la description du processus de mélange, deux propriétés majeures du nuage de gaz sont à préciser. Tout d'abord le milieu observé est transparent aux longueurs d'onde considérées, on parle alors de milieu optiquement mince. Le spectre mesuré pour chaque pixel correspond à l'émission sur toute la profondeur du nuage de matière. Cette situation est à opposer au cas de l'observation de la Terre où le spectre mesuré est réfléchi par une surface opaque. La transparence du milieu impose de prendre en compte la ligne de visée de l'instrument pour décrire les phénomènes de mélange apparaissant dans de telles données.

La seconde propriété concerne la radiance spectrale mesurée en chaque point spatial de l'image. La radiance spectrale est variable spatialement, *i.e.* une portion du nuage de matière peut émettre fortement alors qu'une portion voisine peut émettre très faiblement. Cette variabilité dépend de nombreux paramètres tels que la quantité de matière le long de la ligne de visée (appelée colonne densité), la température locale ou encore la fluorescence liant l'intensité émise à l'intensité du champ de rayonnement UV (lui-même lié à la distance à l'étoile et à l'atténuation du rayonnement par le nuage de matière). Pour plus de détails sur les conditions physiques et chimiques régnant dans ce type de milieu, le lecteur pourra consulter [13, 132]. Ainsi, la radiance spectrale mesurée est spatialement disparate et ne peut être normalisée par le champ de rayonnement UV baignant la nébuleuse. Cette situation est à opposer au cas de l'observation de la Terre où la radiance spectrale mesurée est normalisée par la radiance spectrale solaire.

Chaque pixel représentant une ligne de visée spécifique, le spectre observé associé est donc constitué du mélange des spectres émis par les différentes couches du nuage de matière. Chaque couche du nuage possède une signature spectrale spécifique que l'on appellera composante pure ou composante élémentaire (par analogie, les composantes pures en observation de la Terre sont appelées matériaux). Chaque spectre observé est donc composé du mélange

des spectres élémentaires émis le long de la ligne de visée. En reprenant l'exemple schématisé sur la Figure 2.5, les spectres observés a et b sont composés des spectres élémentaires issus des couches rouge, verte et bleue, alors que le spectre d ne contient que la composante spectrale issue de la couche bleue.

Le mélange le long de la ligne de visée est modélisé par la combinaison linéaire des spectres élémentaires (voir le *chapitre 2* de [13] ainsi que les références qui y sont citées pour une justification du choix du modèle). La pondération associée à chaque spectre élémentaire représente l'intensité mesurée au niveau du pixel. La radiance spectrale mesurée pour un pixel donné est donc modélisée par :

$$\phi(\lambda) = \sum_{\ell=1}^L \alpha_{\ell} \phi_{\ell}(\lambda), \quad (2.7)$$

où α_{ℓ} est le coefficient de pondération associé à la $\ell^{\text{ième}}$ composante élémentaire. Ce coefficient dépend de la colonne densité, de l'intensité locale du champ de rayonnement ou encore de la température locale. On notera que sous certaines conditions de normalisation, le coefficient α_{ℓ} représente l'intensité d'émission.

Par identification avec le modèle de mélange spectral linéaire Eq. (1.15), les radiances spectrales des composantes élémentaires représentent les sources et les coefficients de pondération α_{ℓ} associés représentent les coefficients du mélange. En utilisant les notations usuelles en SAS, le modèle de mélange d'un spectre observé associé à un pixel en astrophysique est donné par :

$$\left\{ \begin{array}{l} x(\lambda) = \sum_{\ell=1}^L a_{\ell} s_{\ell}(\lambda) \\ a_{\ell} \geq 0 \quad \forall \ell \in \{1, \dots, L\} \\ s_{\ell}(\lambda) \geq 0 \quad \forall \ell \in \{1, \dots, L\} \end{array} \right. \quad (2.8)$$

De nouveau, dans la suite du manuscrit on substituera l'indice spectral λ par l'indice n .

Pour conclure, on constate que le modèle de mélange linéaire des radiances spectrales observées est contraint uniquement par la non négativité provenant de la nature des signaux observés.

2.3 Modèle du cube

Dans la section précédente, nous avons défini le modèle de mélange d'un pixel d'une image hyperspectrale. L'application d'une méthode de SAS nécessite avant tout la construction de la matrice des observations X à partir du cube hyperspectral. Il est donc nécessaire de restructurer le cube hyperspectral en une matrice et d'identifier ce que nous appelons observations, échantillons, coefficients de mélange et sources. Comme nous l'avons mentionné précédemment, une image hyperspectrale peut être appréhendée de deux manières, soit on considère que le cube est une collection de spectres soit une collection d'images. Il en résulte donc les deux modèles suivants pour caractériser le mélange observé.

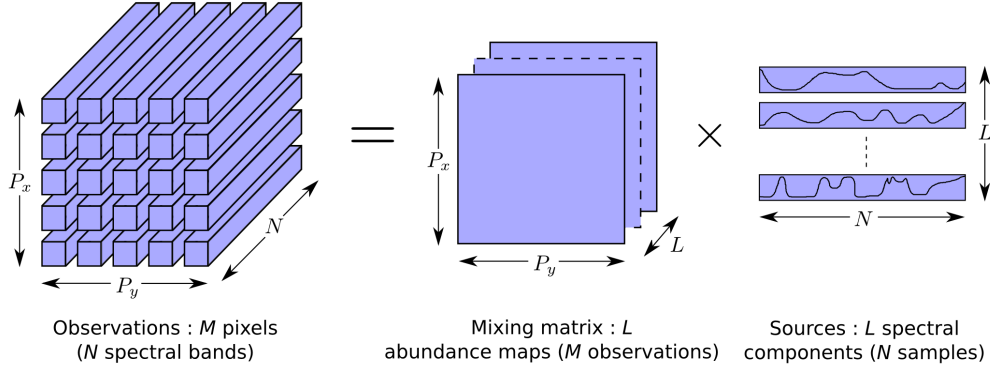


FIGURE 2.6 – Modèle de données avec les sources spectrales.

2.3.1 Modèle spectral

Pour ce modèle de données, nous définissons les observations comme étant les spectres mesurés. Le cube de données est redimensionné en une matrice des observations Obs , où chaque ligne contient un des $P_x \times P_y = M$ spectres arrangés dans n'importe quel ordre et indicés par $m \in \{1, \dots, M\}$. Chaque colonne de Obs correspond à l'indice de l'échantillon spectral $n \in \{1, \dots, N\}$ de toutes les observations. Chaque spectre observé est une combinaison linéaire des L ($L \ll M$) spectres élémentaires inconnus et est le résultat du mélange des mêmes spectres élémentaires :

$$obs(m, n) = \sum_{\ell=1}^L map(m, \ell) spec(\ell, n), \quad (2.9)$$

où $obs(m, n)$ est le $n^{ième}$ échantillon spectral de la $m^{ième}$ observation, $map(m, \ell)$ est la pondération du spectre élémentaire ℓ dans l'observation m et $spec(\ell, n)$ est le $n^{ième}$ échantillon spectral du $\ell^{ième}$ spectre élémentaire. En employant la terminologie de la SAS, map joue le rôle des coefficients de mélange et $spec$ joue le rôle des sources. Ce modèle peut être réécrit sous la forme matricielle :

$$Obs = Map \times Spec, \quad (2.10)$$

où Map est la $M \times L$ matrice de mélange et $Spec$ est la $L \times N$ matrice des spectres sources. Une représentation schématique du modèle spectral est montrée sur la Figure 2.6. Chaque spectre observé est issu du mélange spatial des sources spectrales.

2.3.2 Modèle spatial

Pour ce modèle de données, nous définissons les observations comme étant les bandes spectrales (images). La construction du modèle spatial est réalisée en transposant le modèle spectral (2.10). Dans cette configuration, chaque ligne de la matrice des observations Obs^T contient une des N bandes spectrales redimensionnées en vecteur. Chaque colonne de Obs^T correspond à un indice d'échantillon spatial $m \in \{1, \dots, M\}$ pour toutes les observations (*i.e.* chaque colonne correspond à un pixel). Chaque bande spectrale de Obs^T est une combinaison

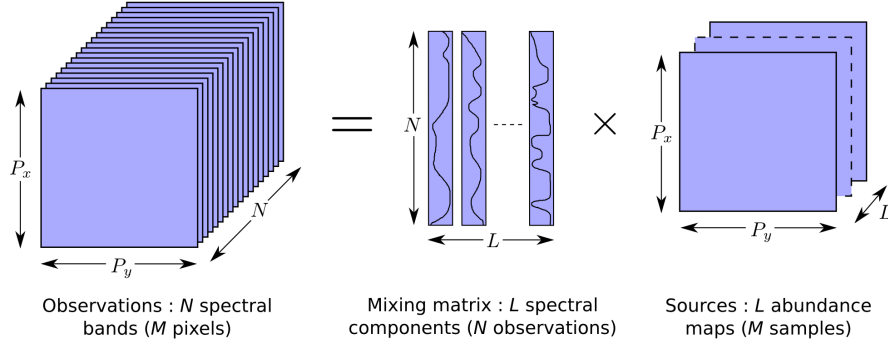


FIGURE 2.7 – Modèle de données avec les sources spatiales.

linéaire des L ($L \ll N$) bandes spectrales inconnues et est le résultat du mélange des mêmes cartes d'abondance :

$$Obs^T = Spec^T \times Map^T. \quad (2.11)$$

avec Obs^T la $N \times M$ matrice des données transposées, $Spec^T$ la $N \times L$ matrice de mélange et Map^T la $L \times M$ matrice des sources. Une représentation schématique du modèle spatial est montrée sur la Figure 2.7. Chaque bande spectrale observée est issue du mélange spectral des sources spatiales.

2.3.3 Choix du modèle

Le choix du modèle spectral ou spatial dépend généralement des hypothèses requises par les méthodes de SAS utilisées. Prenons par exemple le cas des méthodes SCA. Ces méthodes requièrent que les sources soient conjointement parcimonieuses. Cette caractéristique est, selon les applications, soit portée par les spectres (modèle (2.10)) soit portée par les carte d'abondance (modèle (2.11)).

En reprenant les notations usuelles de la SAS utilisées jusqu'ici, nous aurons pour le modèle spectral $X = Obs$ comme matrice des données, $A = Map$ comme matrice de mélange et $S = Spec$ comme matrice des sources.

Pour le modèle spatial nous aurons donc $X = Obs^T$ comme matrice des données, $A = Spec^T$ comme matrice de mélange et $S = Map^T$ comme matrice des sources.

2.4 Méthodes de SAS en observation de la Terre

Cette section présente un panorama des méthodes de démixage spectral utilisées en télédétection. Dans un premier temps, nous évoquerons les travaux utilisant les méthodes usuelles de SAS présentées dans le chapitre précédent, puis dans un second temps nous détaillerons quelques méthodes spécifiques à la télédétection.

2.4.1 Panorama des méthodes standard

2.4.1.1 Analyse en composantes indépendantes

Les méthodes de démixage d'images hyperspectrales basées sur l'ICA sont apparues à la fin des années 90. A titre d'exemple, nous mentionnerons les travaux [7, 92, 137]. En 2005, J.M.P. Nascimento et J.M. Bioucas-Dias proposent une étude de l'efficacité des méthodes ICA en démixage spectral [111], et remettent en cause la majorité des méthodes antérieures. En effet, les auteurs montrent dans cette étude que l'indépendance des sources dans un contexte de télédétection n'est généralement pas vérifiée. Dans le cas où les fractions d'abondance des matériaux sont considérées comme étant les sources (modèle défini par l'équation (2.11)), la somme à 1 des abondances entraîne la dépendance des sources entre elles. Dans le cas où les spectres sont considérés comme étant les sources (modèle défini par l'équation (2.10)), la nature des matériaux observés (*i.e.* différents types de végétation, milieux urbains...) entraîne une corrélation non négligeable des sources entre elles.

Par ailleurs, on mentionnera les travaux de D. Benachir *et al.* [11] présentant une version modifiée de l'ICA permettant son utilisation en télédétection. Dans cette étude, les auteurs proposent d'utiliser l'ICA dans un premier temps, pour estimer approximativement les $L - 1$ sources spatiales indépendantes constituant l'image hyperspectrale. Dans un second temps, les résultats de l'ICA sont utilisés comme initialisation de la NMF. Cette approche hybride permet de compenser les inconvénients propres à l'ICA et la NMF à savoir respectivement, la nécessité d'avoir des sources indépendantes et la non unicité de la solution.

2.4.1.2 Factorisation en matrices non négatives

Parmi les méthodes de démixage utilisées en télédétection, on retrouve des algorithmes basés sur la NMF. Les principales contributions dans ce domaine sont caractérisées par l'ajout à la fonction de coût d'un terme de pénalisation spécifique à la télédétection. On mentionnera par exemple la méthode MVC-NMF [105], générique de ce type d'approche. Cette méthode est détaillée dans la section suivante portant sur les méthodes géométriques. On trouve dans la littérature d'autres méthodes, chacune basée sur une pénalisation propre. Parmi les plus communes, on trouve les méthodes ICE (pour *Iterated Constrained Endmember* en anglais) [12], $L_{1/2}$ -NMF [123] ou encore CoNMF (pour *Collaborative-NMF* en anglais) [93]. Pour plus de détails sur les méthodes de démixage reposant sur la NMF, le lecteur pourra consulter [98] ainsi que les références qui y sont citées.

2.4.1.3 Analyse en composantes parcimonieuses

Une autre classe de méthodes de démixage couramment utilisée en télédétection concerne les méthodes basées sur la SCA. Notons tout d'abord que cette catégorie concerne essentiellement les méthodes semi-supervisées, méthodes utilisant des bibliothèques spectrales permettant l'identification des spectres des matériaux présents dans les données. Dans ce manuscrit, nous nous focalisons sur les méthodes dites aveugles de démixage. Nous ne détaillerons donc pas ce point mais le lecteur pourra consulter [19, 74, 98] regroupant les principaux travaux utilisant ce type d'approche.

Parmi les méthodes de SCA, on peut mentionner également les méthodes géométriques détaillées dans la section suivante. En effet, les méthodes géométriques employées en télédétection sont toutes basées sur des hypothèses plus ou moins fortes de parcimonie des sources.

Dans le premier chapitre, nous avons détaillé la méthode SpaceCORR, basée sur la parcimonie conjointe des sources présentes dans une image. Les travaux de thèse de S. Karoui [78] ont permis d'appliquer ce type d'approche à des images multispectrales en observation de la Terre. Les deux méthodes développées, appelées 2D-Corr-NLS et 2D-Corr-NMF [79], sont des extensions de SpaceCORR prenant en compte la somme à 1 des fractions d'abondance.

Plus récemment, D. Benachir *et al.* proposent de relâcher la contrainte de présence de zones mono-sources de la méthode SpaceCORR en construisant une méthode basée sur l'exploitation de zones bi-sources. En effet, l'hypothèse d'existence de zones d'analyse spatiales dans lesquelles une seule source est active (*Hypothèse 1*, page 29) n'est pas toujours vérifiée dans les données hyperspectrales en observation de la Terre, notamment à cause d'une résolution spatiale trop faible.

La méthode proposée, appelée BiS-Corr, exploite la structure géométrique que prennent les données dans une zone bi-source pour résoudre le problème de SAS. Nous portons un intérêt particulier à cette approche puisque nous proposerons une contribution basée sur une hypothèse relativement similaire dans le Chapitre 5.

La structure de la méthode BiS-Corr est identique à celle de la méthode SpaceCORR. Elle est constituée des trois étapes : détection des zones bi-sources puis identification de la matrice de mélange et enfin reconstruction de la matrice des sources.

L'étape de détection des zones bi-sources est basée sur un critère de corrélation. La contrainte de somme à 1 des abondances des matériaux combinée avec la présence de deux sources dans une zone d'analyse rend les observations proportionnelles au sein de cette zone bi-source.

L'étape d'identification de la matrice de mélange est basée sur la géométrie des données. Le nuage de points associés aux pixels d'une zone bi-source prend la forme d'une droite dans le plan défini par deux bandes spectrales. L'étude de l'intersection d'une droite associée à une zone bi-source avec une seconde droite associée à une seconde zone bi-source donne accès aux coefficients de mélange associés à chaque source. En effet, le point d'intersection de deux droites associées à deux zones bi-sources ayant une unique source en commun correspond au coefficient de mélange relatif à cette source commune. Ainsi il est possible de reconstruire l'intégralité de la matrice de mélange à la condition qu'il existe au moins une zone bi-source pour chaque paire de source.

L'étape de reconstruction des sources est effectuée par un algorithme de moindres carrés non négatifs (NNLS).

Pour finir sur les méthodes usuelles de SAS employées en télédétection, nous citerons quelques exemples de travaux basés sur des méthodes statistiques utilisant des approches bayésiennes [52]. Un panorama des méthodes bayésiennes utilisées pour le démixage en télédétection est disponible dans [19].

Par ailleurs, le lecteur pourra consulter les références [19, 74, 80, 98] résumant l'ensemble des approches utilisées en télédétection mentionnées dans cette section.

2.4.2 Méthodes géométriques

Cette section traitant des méthodes géométriques fait suite à la Section 1.4.5 dans laquelle nous avons présenté les méthodes géométriques pour un modèle linéaire de données non négatives. Suivant ce modèle, les données observées sont incluses dans un cône simplicial de l'orthant positif \mathbb{R}_+^M . Comme nous l'avons montré précédemment, en télédétection le modèle linéaire de données a la contrainte supplémentaire de la somme à 1 des coefficients d'abondance des matériaux (modèle (2.6)). De plus, les méthodes géométriques requièrent une contrainte de parcimonie des sources (nous détaillons ce point ci-après). Classiquement, on suppose que cette hypothèse de parcimonie est spatiale. On se référera donc dans cette section au modèle spatial des données Eq. (2.11). En supposant la matrice de mélange A de rang de colonne plein, l'ensemble des observations :

$$\mathcal{S}(A) = \{x \mid x = As, \sum_{\ell=1}^L s_{\ell} = 1, A \in \mathbb{R}_+^{N \times L}, s_{\ell} \in \mathbb{R}_+^L\}, \quad (2.12)$$

forme un simplexe de dimension $L - 1$ dans \mathbb{R}_+^M . Les sommets de ce simplexe correspondent aux colonnes de la matrice de mélange A . Cette situation est schématisée sur la Figure 2.8 montrant le mélange de 3 sources en 3 dimensions.

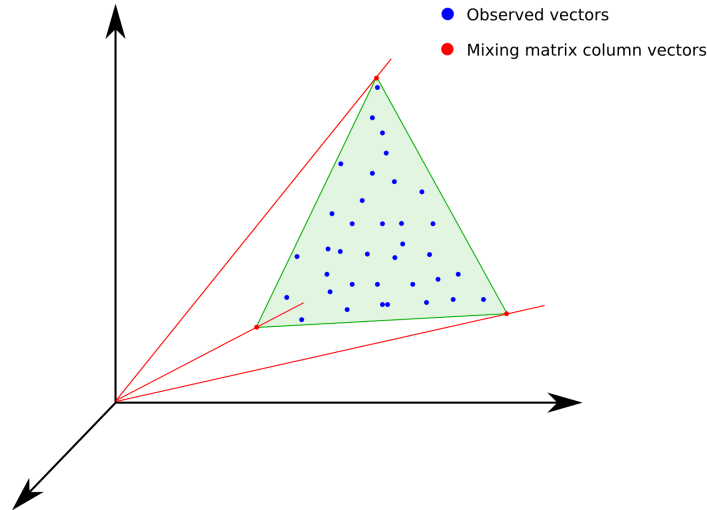


FIGURE 2.8 – Représentation du simplexe englobant les données issues d'un mélange de 3 sources en 3 dimensions. Le simplexe engendré par A et l'enveloppe de X sont confondus si l'*Hypothèse 5*, page 36 est vérifiée.

Le principe des méthodes géométriques en télédétection est identique à celui présenté dans la Section 1.4.5. L'idée générale est d'identifier le simplexe $\mathcal{S}(X)$ englobant les observations. Sous certaines conditions de parcimonie, ce simplexe coïncide avec celui engendré par les colonnes de la matrice de mélange. Ainsi, identifier les sommets du simplexe contenant l'ensemble des observations permet d'estimer la matrice de mélange A et donc de réaliser la séparation des sources.

On trouve dans la littérature deux approches distinctes permettant d'estimer le simplexe $\mathcal{S}(A)$. La première est basée sur la recherche des sommets du simplexe directement à partir des observations. Cette stratégie impose, pour chaque source, la présence d'au moins un pixel pur dans les données (*Hypothèse 5*, page 36). La seconde approche, dite méthode du volume minimal, est basée sur la construction du simplexe de volume minimal englobant l'ensemble des observations. Cette stratégie impose la présence d'au moins $L - 1$ observations sur chaque facette du simplexe (*Hypothèse 6*, page 38).

Dans la suite de cette section, nous décrirons brièvement les méthodes les plus connues en télédétection. Pour un panorama plus complet et plus de détails sur cette catégorie de méthodes, le lecteur pourra consulter [19] ainsi que les références qui y sont citées.

2.4.2.1 Méthodes avec pixels purs

PPI La méthode PPI (pour *Pixel Purity Index* en anglais) [20] procède à l'identification des sommets du simplexe d'intérêt en projetant l'ensemble des données sur un large ensemble de vecteur unitaires générés aléatoirement. Les points extrêmes, pour chaque direction aléatoire, sont stockés. Un compteur enregistre le nombre de fois où un point (*i.e.* un spectre observé) est retenu comme point extrême. Les pixel purs (*i.e.* les sommets du simplexe) correspondent aux pixels ayant obtenu le plus grand score.

N-FINDR La méthode N-FINDR [139] est basée sur les propriétés du volume du simplexe généré par les observations. Le volume du simplexe généré par les pixels purs est plus grand que le volume du simplexe généré par n'importe quelle combinaison linéaire de pixel. L'algorithme de recherche des sommets du simplexe est alors le suivant. Un premier simplexe est construit à partir de pixels sélectionnés aléatoirement parmi les données. La méthode procède ensuite par inflation du simplexe en recherchant les pixels maximisant le volume du simplexe d'intérêt. Les sommets du simplexe retenus sont donc les pixels générant le simplexe englobant l'ensemble des observations.

OSP / VCA La méthode OSP (pour *Orthogonal Subspace Projection* en anglais) [65] est basée sur une succession de projections orthogonales des données pour identifier itérativement les sommets du simplexe. Le premier sommet retenu est le pixel observé ayant la plus grande distance avec l'ensemble des pixels restants. Les sommets suivants sont ensuite obtenus en projetant les données sur un vecteur orthogonal au sous espace engendré par les colonnes de la matrice de mélange déjà identifiée. Le nouveau sommet retenu correspond à la projection extrême. Cette étape de projection / identification est ensuite répétée jusqu'à ce que tous les sommets du simplexe soient identifiés. La méthode VCA (pour *Vertex Component Analysis* en anglais) [112], est très similaire à la méthode OSP. Elle est basée sur le même principe de projection / identification. Cependant la méthode VCA inclut un processus de caractérisation du bruit pour réduire la sensibilité au bruit de la projection. Pour cela, la méthode VCA utilise la SVD pour identifier la direction optimale de projection qui représente au mieux les données (au sens du SNR maximum).

2.4.2.2 Méthodes à volume minimal

Le principe des méthodes à volume minimal a été introduit par M.D. Craig dans [40], et repris par la suite dans plusieurs méthodes géométriques de la littérature. L’approche de ces méthodes est d’estimer la matrice de mélange A qui minimise le volume du simplexe engendré par ses colonnes, sous la contrainte que $\mathcal{S}(A)$ contient l’ensemble des vecteurs observés. Le problème d’optimisation qui découle de cette approche peut être formulé comme suit :

$$\begin{cases} \hat{A} = \underset{A}{\operatorname{argmin}} V_{\mathcal{S}}(A) \\ A^{-1}X \geq 0 \\ \mathbf{1}_L^T A^{-1} = \mathbf{1}_N^T \end{cases} \quad (2.13)$$

où $V_{\mathcal{S}}(A)$ est le volume du simplexe engendré par les colonnes de A . On trouve dans la littérature plusieurs stratégies pour résoudre ce problème d’optimisation non convexe, dont quelques exemples sont mentionnés ci-après.

MVSA / SISAL / MVES La méthode MVSA (pour *Minimum Volume Simplex Analysis* en anglais) [94] est basée sur des méthodes d’optimisation dites “Sequential Quadratic Programming”. La méthode SISAL (pour *Simplex Identification via Split Augmented Lagrangian* en anglais) [17] propose une approche basée sur la résolution séquentielle de sous-problèmes d’optimisation convexe à l’aide d’un algorithme du Lagrangien augmenté.

Les méthodes MVSA et SISAL ont la particularité de permettre une violation de la contrainte de non négativité. Cette caractéristique prend en compte le fait que des vecteurs observés peuvent être en dehors du simplexe à cause du bruit. L’introduction d’une version plus souple de la contrainte de non négativité rend les méthodes SISAL et MVSA plus robustes et plus efficaces pour résoudre le problème d’optimisation. De plus, pour réduire le risque que ces méthodes convergent dans des minima locaux, les auteurs proposent dans les deux cas d’initialiser leurs algorithmes par la matrice estimée grâce à la méthode VCA.

La méthode MVES (pour *Minimum Volume Enclosing Simplex* en anglais) [28] propose une reformulation du problème d’optimisation non convexe permettant ainsi une approche de minimisation cyclique utilisant une méthode de programmation linéaire.

MVC-NMF La méthode MVC-NMF (pour *Minimum Volume Constrained Nonnegative Matrix Factorization* en anglais) [105] est basée sur la prise en compte de la géométrie du problème de SAS par la NMF. Pour ce faire, les auteurs proposent d’ajouter un terme de pénalisation à la NMF portant sur le volume du simplexe engendré par les colonnes de A . Le problème de minimisation se formule suivant :

$$\begin{cases} (\hat{A}, \hat{S}) = \underset{A, S}{\operatorname{argmin}} \frac{1}{2} \|X - AS\|_F^2 + \lambda V_{\mathcal{S}}^2(A) \\ A \geq 0, S \geq 0 \\ \mathbf{1}_L^T S = \mathbf{1}_N^T \end{cases} \quad (2.14)$$

où λ est un paramètre de régularisation contrôlant le poids de la contrainte du volume du simplexe dans la fonction de coût. Ce problème non convexe est résolu alternativement

suivant A et S . Les équations de mises à jour sont déterminées grâce à la méthode du gradient projeté en incluant une projection sur l'orthant positif afin de forcer la non négativité des estimations.

2.5 État de l'art de la SAS en astrophysique

Dans cette section, nous présentons un panorama des méthodes de SAS utilisées en astrophysique (une nouvelle fois, nous nous restreindrons au modèle de mélange linéaire instantané). Bien que moins répandues qu'en observation de la Terre, on trouve en astrophysique une grande diversité d'applications, tant en terme de méthodes qu'en terme de données considérées. D'un point de vue méthodologique, les premiers travaux concernent l'utilisation de la PMF [116]. Cette première application ponctuelle sera suivie par l'utilisation de méthodes basées sur l'ICA quelques années plus tard. On constate d'ailleurs que l'ICA et les méthodes bayésiennes sont les méthodes les plus utilisées par la communauté astrophysique. L'utilisation des méthodes basées sur la NMF ou la SCA sont plus marginales. D'un point de vue champs applicatifs, la majorité des travaux portent sur l'extraction du Fond Diffus Cosmologique (CMB pour *Cosmic Microwave Background* en anglais), avec notamment le développement d'une méthode spécifique basée sur l'ICA. On trouve dans la littérature un ensemble de travaux portant sur l'étude des glaces de Mars. Bien que cette application soit de la planétologie (comme indiqué précédemment, nous ne détaillerons pas ce domaine dans ce manuscrit), nous mentionnons ces travaux majeurs à titre d'illustration. De plus, ce domaine spécifique montre une évolution intéressante de l'utilisation des méthodes de SAS en astrophysique. On trouve également de nombreuses autres applications, telles que l'étude des galaxies, des populations stellaires, du milieu interstellaire ou encore des exoplanètes. Nous évoquerons l'ensemble de ces points dans la suite de cette section.

2.5.1 Analyse en composantes indépendantes

Les méthodes basées sur l'ICA sont d'un grand intérêt pour la communauté astrophysique et notamment en cosmologie avec l'étude du CMB. L'objectif de ces applications est d'isoler le CMB des autres sources perturbatrices présentes dans les données. Parmi les premiers travaux dans ce domaine, on peut citer ceux de D. Maino *et al.* [99] puis de C. Baccigulapi *et al.* [6] utilisant la méthode FastICA [70]. On trouve également dans la littérature la méthode SMICA (pour *Spectral Matching Independent Component Analysis* en anglais) [41, 117] développée spécifiquement pour l'extraction du CMB. Cette méthode a la particularité de pouvoir séparer des sources gaussiennes en travaillant sur les coefficients de Fourier. Par la suite quelques extensions de la méthode SMICA ont été proposées avec, par exemple, les travaux [107] proposant un algorithme opérant sur les coefficients d'ondelettes, puis avec les travaux [4] prenant en compte la polarisation du CMB. Plus généralement, on citera les articles [34, 35] résumant l'utilisation de méthodes de SAS pour l'étude du CMB par la communauté de la mission Planck de l'ESA.

Un autre domaine d'application populaire en astrophysique concerne l'utilisation de l'ICA dans l'étude des glaces de Mars. Les données hyperspectrales fournies par la sonde Mars Express sont analysées dans le but d'étudier la répartition spatiale des glaces de H_2O et de CO_2 .

Les travaux originaux [56] utilisent les algorithmes JADE [26] et FastICA [70]. Cependant les discussions à propos des résultats obtenus (voir [111] et le Chapitre 16 de [37] portant sur les applications de la SAS) montrent que les images sources ne sont pas indépendantes et donc que les hypothèses nécessaires à l'ICA ne sont pas vérifiées. Des investigations ont donc été entreprises pour améliorer ces résultats avec notamment les travaux de S. Moussaoui *et al.* [109] proposant l'emploi d'une approche bayésienne.

Parmi les autres domaines d'application présents dans la littérature, on mentionnera les travaux de D. Nuzillard et A. Bijaoui [113] portant sur l'étude des galaxies grâce aux méthodes FastICA [70] et SOBI [8]. Ces travaux sont probablement les premiers proposant l'utilisation de l'ICA pour l'étude de données astrophysiques, suivi par les travaux de M. Funaro *et al.* [58] utilisant l'ICA pour séparer les artefacts présents dans les données astrophysiques.

Plus récemment, on trouve l'utilisation de l'ICA pour la détection d'exoplanètes avec les travaux de I.P. Waldmann *et al.* [136] portant sur les données Hubble puis avec les travaux de G. Morello *et al.* [106] portant sur les données Spitzer.

2.5.2 Méthodes bayésiennes

Les méthodes bayésiennes de SAS utilisées en astrophysique sont, comme pour les méthodes ICA précédemment citées, essentiellement dédiées à l'extraction du CMB. On mentionnera à titre d'exemple les travaux [129] proposant une approche bayésienne utilisant comme information *a priori* la connaissance des densités spectrales des sources. D'autres exemples d'utilisation de méthodes bayésiennes en cosmologie sont détaillés dans le résumé méthodologique [85], ainsi que dans les résumés portant sur les données Planck [34, 35].

Comme cité précédemment, une approche bayésienne a été développée pour l'étude des glaces de Mars dans [109], pour prendre en compte la corrélation des sources extraites.

Dans un contexte différent, les travaux de K.H. Knuth *et al.* [83] proposent l'utilisation de méthodes bayésiennes de SAS pour l'étude des grandes molécules carbonées présentes dans le milieu interstellaire.

2.5.3 Factorisation en matrices non négatives

L'utilisation de la NMF pour l'étude de données astrophysiques est plus marginale et concerne des domaines différents de ceux mentionnés jusqu'ici. Les travaux de M. Juvela *et al.* [76] datant de 1996 sont probablement les premiers proposant l'utilisation de méthodes de SAS pour l'étude de données astrophysiques. Les auteurs proposent d'étudier l'émission de la nébuleuse Thumbprint grâce à la méthode PMF [116] introduite par P. Paatero *et al.* en 1994.

Plus récemment, les travaux de thèse de I. Meganem [100] portent sur le démixage de spectres stellaires dans les données hyperspectrales de l'instrument MUSE au VLT [104]. Ces travaux concernent l'étude de champs denses d'étoiles pour lesquelles la PSF de l'instrument et les effets atmosphériques peuvent entraîner la superposition de plusieurs spectres stellaires sources au sein d'un même pixel observé. L'objectif est donc de séparer la contribution de chaque étoile dans chaque spectre observé grâce à une méthode basée sur la NMF.

Une autre application proposée par P.D. Hurley *et al.* [69] consiste à identifier les composantes spectrales des galaxies observées par le télescope spatial Spitzer. On notera que les

auteurs utilisent la version de l’algorithme de la NMF proposée par D.D. Lee et H.S. Seung [89].

Enfin, le dernier domaine d’application que nous mentionnerons est celui qui nous concerne directement dans ces travaux de thèse. L’objectif est le développement de méthodes de SAS pour étudier le milieu interstellaire, et plus précisément les régions de photodissociation. L’étude de ces régions par la SAS a été initiée par O. Berné *et al.* Dans leur travaux, les auteurs appliquent la NMF aux données hyperspectrales de Spitzer [16], puis de Herschel [15], afin de caractériser les conditions physico-chimiques régnant au sein d’une région de photodissociation.

2.5.4 Analyse en composantes parcimonieuses

Les méthodes de SAS basées sur la SCA sont peu utilisées en astrophysique. La principale contribution dans ce domaine concerne les travaux de Bobin, Starck *et al.* portant sur l’extraction du CMB des données Planck. Les auteurs proposent l’utilisation de la méthode GMCA [21] initialement développée dans un contexte de traitement d’images puis de la méthode AMCA [22] prenant en compte la parcimonie et la possible corrélation des sources présentes dans les données astrophysiques.

Plus spécifiquement, on mentionnera les travaux de thèse de M. Puigt [122] portant sur les méthodes de SAS du type TiF/Temp - ROM/CORR détaillées dans la Section 1.4.3, appliquées au signaux de parole. On trouve dans son manuscrit une première tentative d’application de cette classe de méthodes aux données astrophysiques. Les données étudiées sont issues de Spitzer et portent sur l’étude des poussières dans le milieu interstellaire. Les résultats obtenus sont ensuite comparés aux études réalisées par O. Berné *et al.* avec les mêmes données mais cette fois ci à l’aide des méthodes FastICA [70] et NMF [89]. Les résultats de cette première tentative sont mitigés puisque les méthodes n’arrivent qu’à extraire partiellement les sources présentes dans le mélange. Cependant l’auteur M. Puigt précise que les méthodes ne sont pas adaptées à ce type de données. En effet le faible nombre d’échantillons disponibles dans les spectres observés est le principal facteur limitant dans la définition de zones d’analyse exploitables par les méthodes.

2.6 Étude de nos données et choix méthodologiques

Nous finirons ce chapitre par une présentation des données sur lesquelles nous travaillons. Une brève étude des caractéristiques de ces données permet d’orienter le choix de méthodes de SAS que nous utiliserons pour réaliser la décomposition des images hyperspectrales. De plus, les limites des méthodes disponibles dans la littérature applicables à nos données permettent d’esquisser les axes de nos contributions présentées dans les chapitres suivants de ce manuscrit. Pour finir, le choix méthodologique permet de fixer le modèle de mélange linéaire (spatial ou spectral) utilisé dans la suite de ce manuscrit. Nous développons l’ensemble de ces points dans la suite de cette section.

2.6.1 Caractéristiques des images hyperspectrales

Ces travaux de thèse se positionnent dans l'étude de régions de photodissociation réalisée par O. Berné *et al.* (voir par exemple [15, 16]), l'objectif étant d'apporter une contribution méthodologique aux méthodes de SAS utilisées en astrophysique.

Les données hyperspectrales à notre disposition pour ces travaux sont issues des instruments IRS (pour *Infrared Spectrograph* en anglais) et HIFI (pour *Heterodyne Instrument for the Far-Infrared* en anglais) embarqués respectivement sur les télescopes spatiaux Spitzer (NASA) et Herschel (ESA). Les images hyperspectrales fournies par ces deux instruments permettent, de par leurs caractéristiques, l'accès à une information différente.

Les images hyperspectrales de IRS-Spitzer sont des données IR sur la plage de longueurs d'onde 5.2-38 μm couverte par 4 modules distincts (chacun ayant une bande d'observation et une résolution spectrale spécifique). Les spectres mesurés puis traités par la SAS, permettent l'identification de la composition chimique des grains de poussière présents dans le nuage de gaz. La cartographie de la nébuleuse obtenue à l'issue de la SAS, permet ainsi d'obtenir la répartition spatiale des différentes populations de grains de poussière.

La Figure 2.9 montre la cartographie de la région nord de la nébuleuse NGC7023 par IRS-Spitzer. La mesure est réalisée par le module "Short-Low" de l'instrument donnant une couverture spectrale de 5.2-14.5 μm à la résolution spectrale de $\frac{\lambda}{\Delta\lambda} = 60-120$ (résolvance). La résolution spatiale de ce module est 3.6'' d'arc, soit 1.8'' d'arc par pixel. L'image hyperspectrale a au final une dimension de 29×39 pixels pour 202 bandes spectrales.

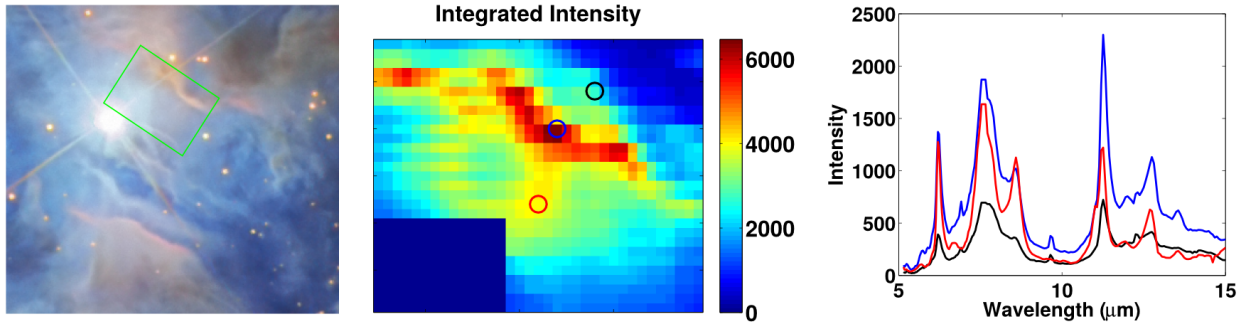


FIGURE 2.9 – NGC7023-NW cartographiée par IRS-Spitzer. A gauche, le rectangle vert définit la zone cartographiée dans une image couleur grand champ. Au centre, la carte d'intensité intégrée suivant l'axe spectral. A droite, les spectres sélectionnés dans le cube de données aux positions indiquées sur la carte.

Les images hyperspectrales de HIFI-Herschel sont des données IR sur les plages de fréquence 480-1250 GHz et 1410-1910 GHz, divisées en 6 bandes d'observation. La haute résolution spectrale de l'instrument permet d'obtenir le profil de raies d'émission spécifiques (raie de structure fine [CII] de l'ion C^+ à 158 μm soit 1900 GHz, dans l'étude qui nous concerne). Ainsi les spectres mesurés permettent l'étude de la cinématique des gaz au sein de la nébuleuse. La Figure 2.10 montre la cartographie de la nébuleuse de la Tête de Cheval et de la région nord de la nébuleuse NGC7023-NW par HIFI-Herschel. La mesure est réalisée

par la “Bande 6” de l’instrument (1600-1910 GHz). La résolution spectrale à 1900 GHz est de ~ 1.2 MHz et la résolution spatiale à 1900 GHz est de $11''$ d’arc, soit $5''$ d’arc par pixel. Au final, l’image hyperspectrale de la Tête de Cheval a une dimension de 115×96 pixels pour 286 bandes spectrales, celle de NGC7023-NW a une dimension de 32×39 pixels pour 306 bandes spectrales.

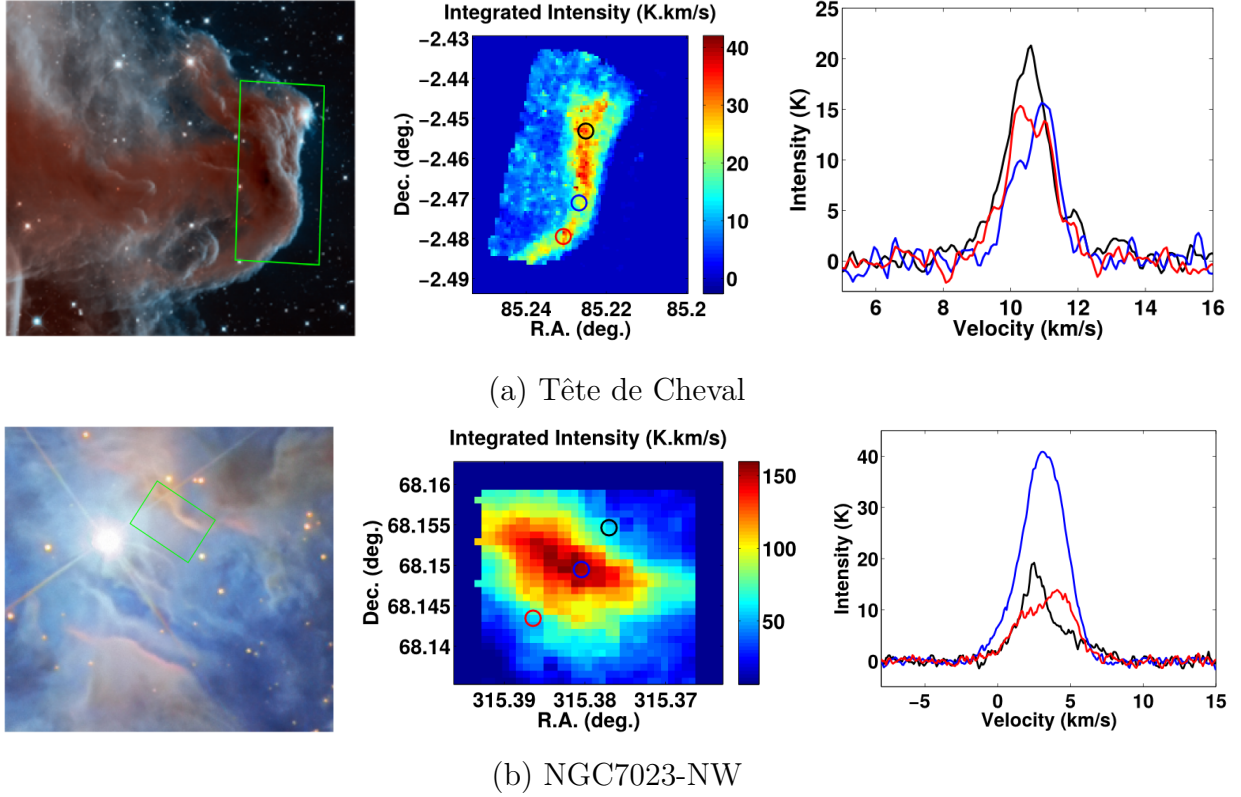


FIGURE 2.10 – La Tête de Cheval (en haut) et NGC7023-NW (en bas) cartographiées par HIFI-Herschel. A gauche, le rectangle vert définit la zone cartographiée. Au centre, la carte d’intensité intégrée suivant l’axe spectral. A droite, les spectres sélectionnés dans le cube de données aux positions indiquées sur la carte.

On notera que l’axe spectral pour les données HIFI-Herschel (Figure 2.10) est exprimé en vitesse et non en longueur d’onde. Une information pertinente extraite de ces spectres étant le décalage en vitesse par effet Doppler de la raie observée, il est alors plus aisé d’exprimer l’axe en vitesse par la relation : $v = c \times (f - f_0)/f_0$ où f est la fréquence observée, f_0 la fréquence intrinsèque de la raie [CII] à 1900 GHz et c la vitesse de la lumière.

2.6.2 Choix méthodologiques

Au début de ce chapitre, nous avons décrit les processus physiques conduisant aux mélanges des données hyperspectrales. Ce mélange est modélisé par un modèle linéaire instantané (une justification précise de ce choix est disponible le *chapitre 2* de [13]). La résolution du problème mal posé de SAS passe par l’ajout d’hypothèses spécifiques (indépendance des

sources, non négativité, parcimonie...) conduisant aux différentes classes de méthodes de SAS. Nous étudions ces différentes hypothèses pour les données considérées ici, ce qui nous permet de fixer le choix du modèle spectral ou spatial.

2.6.2.1 Classe de méthodes

Les méthodes basées sur l'ICA nécessitent l'indépendance statistique des sources. Considérons tout d'abord le modèle de mélange de sources spectrales Eq. (2.10). Les données IRS-Spitzer présentent une forte corrélation des sources spectrales due à la nature chimique très proche des différentes populations de poussière nommées PAH^+ , PAH^0 et VSG (voir [16] pour plus de détails). Les données HIFI-Herschel présentent également une forte corrélation des sources spectrales due au fait que l'on observe une unique raie d'émission, l'étalement et le décalage Doppler de cette raie étant recouvrante d'une source à l'autre.

On considère maintenant le modèle de mélange de sources spatiales Eq. (2.11). Les données IRS-Spitzer dans cette configuration présentent également une forte corrélation des sources spatiales. La répartition des différents grains de poussières est directement liée à l'intensité du rayonnement UV, et donc à la distance à l'étoile (stratification du nuage de gaz). Ainsi les PAH^+ sont abondants près de l'étoile et à mesure que la distance à l'étoile augmente, on observe une augmentation progressive de l'abondance des PAH^0 et une diminution progressive de l'abondance des PAH^+ . On observe le même phénomène en s'éloignant davantage de l'étoile avec l'apparition progressive des VSG conjointement à la disparition progressive des PAH^0 . Les données HIFI-Herschel présentent une corrélation spatiale due, dans le cas de la Tête de Cheval, à la proximité des pics d'émission des deux sources spatiales présentes dans les données. Dans le cas de NGC7023-NW, on observe également une corrélation spatiale due à la stratification des sources spatiales.

On en conclut que les méthodes basées sur l'ICA ne sont pas adaptées pour ces données.

Les données considérées ici sont non négatives de par leur nature physique (spectres d'émission). Les méthodes basées sur la NMF sont donc adaptées dans notre contexte. O. Berné *et al.* ont déjà utilisé les algorithmes de Lee et Seung [89] sur les données IRS-Spitzer [16] et pour l'étude de la Tête de Cheval [15]. Nous proposerons d'étendre ces applications dans le chapitre suivant.

En ce qui concerne les méthodes basées sur la SCA, nous devons de nouveau distinguer les deux modèles spatial et spectral.

Dans le cas d'une approche spectrale Eq. (2.10), les données considérées ici ne sont pas conjointement parcimonieuses. Les différentes populations de poussières détectées dans les données IRS-Spitzer ont des raies d'émissions situées aux mêmes longueurs d'onde et les données HIFI-Herschel présentent la même caractéristique par définition (observation d'une raie d'émission spécifique qui sera décalée par effet Doppler, les deux décalages extrêmes étant recouvrants). On ne peut donc pas identifier dans les trois jeux de données un intervalle de longueurs d'onde (et même une longueur d'onde) où une unique source est active.

Dans le cas d'une approche spatiale Eq. (2.11), l'hypothèse d'une parcimonie conjointe des sources spatiales est parfaitement justifiée. En effet, la stratification du nuage de gaz due à l'intensité du champ de rayonnement UV isole les populations de poussières dans certaines

régions de la nébuleuse (données IRS-Spitzer). Pour les données HIFI-Herschel, certaines régions des nébuleuses observées peuvent être homogène en terme de dynamique (mouvement relatif par rapport à l'observateur) dû à la configuration géométrique du trio étoile, surface du nuage de gaz et ligne de visée de l'instrument. Ces portions du nuage de matière ne contiennent qu'une unique source spatiale. Les méthodes SCA sont donc utilisables dans une configuration de sources spatiales. De plus, les données étant à la fois non négatives et spatialement parcimonieuses, les méthodes géométriques peuvent également être adaptées dans cette étude.

Dans le chapitre suivant, nous quantifierons les différentes propriétés de corrélation et de parcimonie des sources.

2.6.2.2 Modèle de mélange

Comme décrit précédemment, les données considérées sont non négatives et présentent de la parcimonie conjointe spatiale. Afin d'exploiter cette dernière propriété pour la décomposition du cube de données, il est nécessaire de considérer les sources spatiales, et donc de modéliser le cube hyperspectrale suivant le modèle Eq. (2.11). Notons que les algorithmes standard de la NMF (i.e. sans contraintes supplémentaires sur les matrices A et/ou S) énoncés dans la Section 1.4.2.2 sont insensibles aux choix du modèle spatial ou spectral. En effet, le passage d'un modèle à l'autre se fait par transposition, et de même, on passe d'une équation de mise à jour à l'autre par simple transposition.

Par souci de simplicité, nous utiliserons donc dans l'ensemble de ce manuscrit le modèle spatial. Pour ce modèle, une observation est une bande spectrale de l'image hyperspectrale et un échantillon est un pixel de cette bande spectrale. Une observation est le résultat d'un mélange spectral de sources spatiales :

$$x(n, m) = \sum_{\ell=1}^L a(n, \ell) s(\ell, m) \quad (2.15)$$

On notera que l'indice n se réfère à l'axe spectral de l'image hyperspectral, exprimé en longueur d'onde pour les données Spitzer et en vitesse pour les données Herschel. L'indice m se réfère à la position du pixel dans une bande spectrale vectorisée. En utilisant les notation usuelle de la SAS, ce modèle de mélange s'écrit sous forme matricielle :

$$X = AS \quad (2.16)$$

où $X \in \mathbb{R}_+^{N \times M}$ est la matrice des données observées (chaque ligne est une bande spectrale vectorisée et chaque colonne un spectre observé), $A \in \mathbb{R}_+^{N \times L}$ est la matrice de mélange contenant les L spectres élémentaires présents dans les données et $S \in \mathbb{R}_+^{L \times M}$ la matrice des sources spatiales (chaque ligne correspond à une image source vectorisée).

2.6.3 Positionnement de nos travaux

Au regard des propriétés des données dont nous disposons, notre choix de méthode de SAS se porte naturellement vers la NMF, exploitant la non négativité des données, et vers la méthode SpaceCORR, méthode utilisant la parcimonie spatiale des images.

Cependant, l'inconvénient majeur de la NMF est qu'elle souffre d'un problème de non unicité de la solution (voir Section 1.4.2.3). Dans leur travaux portant sur l'application de la NMF aux données Spitzer [16] puis Herschel [15], O. Berné *et al.* proposent une approche pour contrer cet inconvénient. Pour notre première contribution, nous poursuivrons cette idée d'améliorer la convergence de la NMF dans le Chapitre 3.

La méthode SpaceCORR, quant à elle est sensible à la présence de zone d'analyse mono-source pour chaque source (*Hypothèse 1*, page 29). Dans de nombreux cas, cette hypothèse peut ne pas être strictement vérifiée par les données, ce qui réduit ainsi directement les performances de la méthode. Nous détaillerons ce point dans le Chapitre 3 portant sur la méthode SpaceCORR appliquée aux images hyperspectrales. Plusieurs approches sont possibles pour contrer cet inconvénient. La première consiste à utiliser SpaceCORR pour initialiser la NMF. Cette hybridation permet de tirer parti des avantages des deux méthodes tout en compensant leurs inconvénients respectifs. Cette approche est détaillée dans le Chapitre 3.

Une seconde approche possible est de réduire la dimension des zones d'analyse au minimum, *i.e.* à un seul pixel. Cette approche est développée dans le Chapitre 4.

Enfin une dernière approche consiste à permettre la présence de quelques sources par zones d'analyse aux prix d'une contrainte supplémentaire. Cette approche est étudiée dans le Chapitre 5.

Conclusion

Tout au long de ce chapitre nous avons abordé les différents aspects de la SAS pour la décomposition d'images hyperspectrales. Nous avons dans un premier temps détaillé le principe de formation d'une image hyperspectrale puis décrit les phénomènes de mélange pouvant apparaître dans deux applications en particulier. Le cas de la télédétection ne nous concerne pas directement mais cette application étant abondamment étudiée dans la littérature, il était nécessaire de l'évoquer dans ce manuscrit. Le cas de l'astrophysique, et en particulier l'étude des régions de photodissociation, constitue le contexte de ces travaux. Dans un second temps, nous avons réalisé un état de l'art des méthodes de SAS pour ces deux applications.

Nous disposons, dans le cadre de ces travaux de thèse, de trois jeux de données hyperspectrales astrophysiques (La nébuleuse de la Tête de Cheval acquise par Herschel, la nébuleuse NGC7023-NW acquise par Herschel et Spitzer) présentant les caractéristiques ci-après. Les sources (spatiales ou spectrales) sont corrélées, les données sont non négatives et elles présentent de la parcimonie conjointe spatiale. Le choix méthodologique pour la décomposition de ces images est alors le suivant. Dans le chapitre 3 nous étudierons la décomposition réalisée par les méthodes NMF et SpaceCORR ainsi qu'une version hybride de ces deux approches. Dans le chapitre 4 nous proposons une approche géométrique basée sur l'hypothèse de présence de pixels purs dans les observations. Et enfin dans le chapitre 5, nous proposons une méthode géométrique autorisant la présence de quelques sources par zones d'analyse aux prix d'une contrainte supplémentaire.

Chapitre 3

Méthodes hybrides SpaceCORR-NMF

Sommaire

Introduction	69
3.1 Limites de SpaceCORR et de la NMF	69
3.2 Approche proposée	70
3.2.1 La méthode SpaceCORR	70
3.2.1.1 Étape de détection des zones mono-sources	70
3.2.1.2 Étape d'estimation de la matrice de mélange	71
3.2.1.3 Étape de reconstruction des sources	71
3.2.2 La méthode MC-NMF	72
3.2.2.1 Algorithme multiplicatif et normalisation	72
3.2.2.2 Analyse Monte-Carlo	73
3.2.2.3 Reconstruction des sources	74
3.2.3 Les méthodes hybrides	75
3.3 Résultats expérimentaux sur données synthétiques	76
3.3.1 Construction des données synthétiques réalistes	76
3.3.1.1 Modélisation des spectres élémentaires	76
3.3.1.2 Modélisation des cartes d'abondance	77
3.3.2 Mesures de performances	78
3.3.2.1 Mesure d'erreur pour les cartes d'abondance	79
3.3.2.2 Mesure d'erreur pour les spectres élémentaires	79
3.3.2.3 Mesure de la dispersion des solutions de la MC-NMF	80
3.3.3 Performances des méthodes	81
3.3.3.1 SpaceCORR	82
3.3.3.2 MC-NMF	86
3.3.3.3 SCA-NMF-Spec	90
3.3.3.4 SCA-NMF-Map	94
3.3.4 Comparaisons et discussion des résultats	98
3.3.4.1 Apports de SCA-NMF-Spec	98
3.3.4.2 Apports de SCA-NMF-Map	99

3.3.4.3	Conclusion des tests synthétiques	100
3.4	Résultats expérimentaux sur données réelles	101
3.4.1	SpaceCORR	102
3.4.2	MC-NMF	104
3.4.3	Méthodes hybrides	105
3.4.4	Bilan de l'étude du cas réel	106
Conclusion	109

Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons arrêté notre choix méthodologique sur les classes de méthodes NMF et SCA pour décomposer les données hyperspectrales astrophysiques à notre disposition. Dans ce chapitre, nous développerons notre première contribution consistant à combiner la NMF avec la méthode SpaceCORR évoquée dans le premier chapitre. L’objectif de cette méthode hybride est de tirer parti des avantages des deux méthodes tout en contrebalançant leurs inconvénients respectifs. Après avoir détaillé notre méthode hybride, nous évaluerons ses performances sur un ensemble de données synthétiques puis nous l’appliquerons à nos données réelles.

3.1 Limites de SpaceCORR et de la NMF

Théoriquement, la NMF se prête bien à notre problème de démixage de données non négatives. Cependant, comme nous l’avons détaillé dans la Section 1.4.2.3, la NMF souffre de deux inconvénients majeurs :

- La factorisation $X = AS$ possède une infinité de solutions sous la seule contrainte de non négativité.
- La fonction de coût $\mathcal{J}(A, S)$ à minimiser est non convexe simultanément suivant les deux variables A et S . Elle contient donc des minima locaux ce qui rend la méthode NMF sensible à l’initialisation.

Notre proposition pour améliorer les performances de la NMF dans notre contexte astrophysique est d’initialiser la NMF avec les résultats obtenus par une autre méthode. Ainsi l’initialisation fournie est proche de la vraie solution et est donc moins susceptible de faire converger l’algorithme dans un minimum local.

L’utilisation de SpaceCORR dans notre contexte est justifiée si on considère des sources spatiales (voir Section 2.6.2 pour plus de détails). Cependant l’efficacité de la méthode repose essentiellement sur la présence de zones mono-sources pour chaque source (*Hypothèse 1*, page 29), la dimension des zones d’analyse étant un paramètre significatif dans les performances de la méthode. En effet, de trop petites zones ne permettent pas d’évaluer la qualité mono-source des zones, et a contrario, de trop grandes zones ne garantissent pas la présence de zones mono-sources. La dimension des zones doit donc être compatible avec les données. De plus un trop grand nombre de sources ou un faible nombre de pixels dans les images peuvent compromettre les performances de SpaceCORR.

Plusieurs approches sont possibles pour contrebalancer ces inconvénients.

- Une première approche possible est de réduire la dimension des zones d’analyse au minimum, *i.e.* à un seul pixel. Cette approche est développée dans le Chapitre 4.
- Une seconde approche est de permettre la présence de quelques sources par zone aux prix d’une contrainte supplémentaire. Cette approche est étudiée dans le Chapitre 5.
- Une troisième possibilité, détaillée dans ce chapitre, est d’affiner les résultats de SpaceCORR grâce à la NMF. Ainsi même si SpaceCORR fournit une estimation grossière d’une ou plusieurs sources ainsi que de leurs coefficients de mélange associés, les résultats approximatifs sont affinés par la NMF.

3.2 Approche proposée

Précédemment, nous avons souligné les inconvénients à résoudre le problème de démixage d'images hyperspectrales en utilisant seulement la NMF ou SpaceCORR. Nous proposons donc une approche tirant avantage de ces deux méthodes en gommant leurs inconvénients respectifs. La méthode hybride se décompose en deux étapes naturelles. La première étape consiste à appliquer SpaceCORR aux données dans le but d'obtenir une première décomposition pouvant être approximative. La seconde étape consiste à initialiser la NMF avec les résultats de SpaceCORR pour affiner ces résultats.

3.2.1 La méthode SpaceCORR

Nous précisons ici l'algorithme de SpaceCORR que nous utilisons pour décomposer une image hyperspectrale. Cette version diffère légèrement de la version originale introduite par I. Meganem *et al.* [102] ou de la version utilisée par S. Karoui *et al.* [78, 79] en observation de la Terre (voir Section 1.4.3.5 pour plus de détails).

En premier lieu, nous modifions quelque peu les notations du modèle de mélange linéaire Eq. (2.15) sans en changer la nature. Cette opération a pour but d'alléger les notations utilisées dans ce chapitre, sans modifier le contenu des différentes matrices X , A et S . Le modèle de mélange linéaire de sources spatiales s'écrit :

$$x_n(m) = \sum_{\ell=1}^L a_{n\ell} s_\ell(m) \quad \forall m \in \{1, \dots, M\}, \quad (3.1)$$

où x_n est la $n^{\text{ième}}$ ligne de X (*i.e.* la $n^{\text{ième}}$ bande spectrale de l'image) et s_ℓ la $\ell^{\text{ième}}$ ligne de S (*i.e.* la $\ell^{\text{ième}}$ source spatiale). L'indice m correspond à la position spatiale d'un pixel dans l'image.

A partir de ce modèle linéaire spatial, nous reformulons l'*Hypothèse 1* (page 29) nécessaire aux méthodes basées sur la parcimonie conjointe des sources :

Hypothèse 7 : Chaque source est spatialement accessible *i.e.* pour chaque source, il existe au moins une zone spatiale Z où cette source est isolée.

Le domaine spatial d'analyse est divisé en zones Z constituées de quelques pixels adjacents (typiquement des zones carrées de 5×5 pixels) possiblement recouvrantes. Les différentes étapes de SpaceCORR sont énoncées comme suit :

3.2.1.1 Étape de détection des zones mono-sources

Les zones mono-sources sont détectées en mesurant la corrélation entre chaque bande spectrale au sein de la zone d'analyse Z considérée :

$$R\{x_i, x_j\}(Z) = \frac{1}{\text{Card}(Z)} \sum_{m \in Z} x_i(m) x_j(m) \quad \forall i, j \in \{1, \dots, N\}, i < j, \quad (3.2)$$

où $Card(Z)$ correspond au nombre de pixels dans une zone Z . Notons ici que contrairement aux méthodes basées sur la corrélation décrite dans la Section 1.4.3.4, on évalue la corrélation entre tous les couples de bandes spectrales possibles et non en utilisant une bande spectrale de référence. Selon la *Propriété 4* (page 31), une zone d'analyse Z est mono-source si est seulement si :

$$|\rho\{x_i, x_j\}(Z)| = 1 \quad \forall i, j \in \{1, \dots, N\}, i < j. \quad (3.3)$$

Ainsi, la meilleure zone mono-source correspond à la zone où le critère :

$$q_Z = \text{mean}_{i < j} \{|\rho\{x_i, x_j\}(Z)|\}, \quad (3.4)$$

est le plus proche de 1. En pratique on conservera toutes les zones dont le critère de qualité mono-source q_Z est supérieur à un seuil choisi par l'utilisateur.

3.2.1.2 Étape d'estimation de la matrice de mélange

Chaque zone mono-source précédemment identifiée conduit à une estimation d'une colonne de la matrice de mélange suivant le rapport :

$$\frac{R\{x_1, x_n\}(Z)}{R\{x_1, x_1\}(Z)} = \frac{a_{n\ell_0}}{a_{1\ell_0}} \quad \forall n \in \{1, \dots, N\}, \quad (3.5)$$

où ℓ_0 est l'indice de la source contenue dans la zone mono-source. Notons ici que l'utilisation de la bande spectrale d'indice 1 comme signal de référence est arbitraire. En pratique on utilise comme bande spectrale de référence la bande ayant la plus grande puissance afin de limiter le risque d'avoir comme référence une bande fortement bruitée.

L'identification de la matrice de mélange est réalisée par la classification de toutes les colonnes précédemment estimées avec l'algorithme du k-means [131]. Pour chaque cluster, on choisit la moyenne des colonnes contenues dans le cluster comme estimation finale de la colonne de la matrice de mélange.

3.2.1.3 Étape de reconstruction des sources

L'étape finale de SpaceCORR consiste à estimer les L sources spatiales à partir de l'estimation des spectres élémentaires et des observations, sous la contrainte de non négativité. Ainsi pour chaque pixel observé d'indice $m \in \{1, \dots, M\}$, les sources sont estimées suivant :

$$\mathcal{J}(s(m)) = \frac{1}{2} \|x(m) - As(m)\|_2^2, \quad s(m) \geq 0, \quad (3.6)$$

où $x(m)$ est le $m^{\text{ième}}$ spectre observé (*i.e.* la $m^{\text{ième}}$ colonne de X) et $s(m)$ le vecteur des contributions spatiales associées à chaque spectre élémentaire (*i.e.* la $m^{\text{ième}}$ colonne de S). Cette optimisation est un problème classique de moindres carrés non négatifs (NNLS) [88]. Cette étape est réalisée pour chaque pixel observé et permet au final de reconstruire l'ensemble des images sources.

En pratique, l'algorithme de SpaceCORR se résume donc à :

Entrées : X l'ensemble des bandes spectrales observées, L le nombre de sources.

Sorties : A les spectres élémentaires, S les cartes sources.

1. Parcours de tout l'espace spatial du cube et calcul pour chaque zone Z du coefficient de qualité mono-source q_Z avec Eq. (3.4).
2. Sélection des zones mono-sources en ne conservant que les zones dont le coefficient de qualité est supérieur à un seuil.
3. Pour chaque zone mono-source, estimation de la colonne de la matrice de mélange associée avec Eq. (3.5).
4. Classification des colonnes potentielles précédemment obtenues en L ensembles. Le centre de chaque cluster donne une estimation de chaque colonne de A .
5. Reconstruction des sources S par minimisation du critère Eq. (3.6) (NNLS).

3.2.2 La méthode MC-NMF

La version de la NMF que nous utilisons est basée sur les algorithmes multiplicatifs de Lee et Seung [89] (voir Section 1.4.2.2 pour plus de détails). Dans la Section 1.4.2.3 portant sur la convergence et l'unicité de la NMF, nous avons mentionné un ensemble de stratégies possibles pour améliorer les résultats de la NMF (*e.g.* choix de l'initialisation, ajout de contrainte supplémentaire...). Nous discuterons de l'initialisation dans la section suivante. La version "seule" (en opposition à la méthode hybride) décrite ici comprend un algorithme multiplicatif auquel on ajoute une version modifiée de l'analyse Monte-Carlo introduite par O. Berné *et al.* [15] et une étape de normalisation à chaque itération. La méthode complète que nous proposons, appelé MC-NMF (pour Monte-Carlo NMF) est décrite dans les paragraphes suivants.

3.2.2.1 Algorithme multiplicatif et normalisation

Nous rappelons ici l'algorithme multiplicatif de Lee et Seung basé sur la distance euclidienne $\mathcal{D}(X||AS)$ comme mesure de similarité. La fonction de coût à minimiser est donc :

$$\mathcal{J}(A, S) = \frac{1}{2} \|X - AS\|_F^2. \quad A \geq 0, S \geq 0. \quad (3.7)$$

Les équations de mise à jour multiplicatives permettant l'estimation des matrices A et S sont alors les suivantes :

$$S \leftarrow S \odot (A^T X) \oslash (A^T A S) \quad (3.8)$$

$$A \leftarrow A \odot (X S^T) \oslash (A S S^T). \quad (3.9)$$

A chaque itération, les spectres estimés (*i.e.* les colonnes de la matrice A) sont normalisés suivant :

$$\sum_{n=1}^N a_\ell(n) = 1 \quad \forall \ell \in \{1, \dots, L\}, \quad (3.10)$$

où a_ℓ est la $\ell^{\text{ième}}$ colonne de A . Cette étape de normalisation a pour objectif de réduire le domaine des solutions possibles en compensant l'indétermination d'échelle de la décomposition (voir l'expérimentation sur données réelles de la Section 3.4.2). Enfin la condition d'arrêt fixant la convergence de l'algorithme est basée sur la variation de la distance \mathcal{D} entre deux itérations successives :

$$\frac{\mathcal{D}^{(k)}(X||\hat{A}\hat{S}) - \mathcal{D}^{(k-1)}(X||\hat{A}\hat{S})}{\mathcal{D}^{(k)}(X||\hat{A}\hat{S})} \leq \epsilon, \quad (3.11)$$

où $\mathcal{D}^{(k)}$ est la valeur de la distance \mathcal{D} à l'itération k .

3.2.2.2 Analyse Monte-Carlo

L'objectif de cette étape est de réduire l'influence des minima locaux et donc de compenser la non unicité de la solution obtenue. Pour cela, les spectres élémentaires (*i.e.* la matrice de mélange A) est estimée par une analyse Monte-Carlo. L'idée est de réaliser un grand nombre K (typiquement 100) de NMF avec une initialisation aléatoire à chaque factorisation. On obtient ainsi K estimations différentes de la matrice A , contenant chacune une estimation des L spectres élémentaires. Ces $K \times L$ spectres sont ensuite regroupés en L classes $\{\omega_1, \dots, \omega_L\}$ par une méthode de classification. Comme pour l'étape d'estimation de la matrice de mélange de la méthode SpaceCORR (Section 3.2.1), nous utilisons l'algorithme du k-means [131]. Chaque classe ω_ℓ obtenue contient toutes les estimations du même spectre élémentaire associé à une source.

Dans la version proposée par O. Berné *et al.* [15], les spectres finaux (*i.e.* l'estimation des colonnes de la matrice A) sont obtenus en choisissant comme représentant d'une classe le centre de chaque cluster. La variance intra-classe des individus permettait de quantifier la dispersion des solutions données par la NMF.

Nous proposons une alternative pour estimer le spectre le plus représentatif d'une classe en utilisant une estimation de la densité de probabilité (PDF pour *Probability Density Function* en anglais) des K intensités obtenues à chaque échantillon de longueur d'onde.

La méthode des noyaux de Parzen ou fenêtres de Parzen [131] est une méthode non paramétrique permettant d'estimer la PDF d'une variable aléatoire en chaque point de son support.

Ainsi pour une classe et une longueur d'onde donnée, on obtient une estimation de la PDF de l'intensité u du rayonnement, notée $f_{\omega_\ell, n}$. Une estimation du spectre élémentaire le plus représentatif d'une classe est obtenue en sélectionnant, pour chaque échantillon de longueur d'onde, l'intensité u la plus probable :

$$\hat{a}_\ell(n) = \underset{u}{\operatorname{argmax}} f_{\omega_\ell, n}(u) \quad \forall \ell \in \{1, \dots, L\}, \quad (3.12)$$

où \hat{a}_ℓ est l'estimation de la $\ell^{\text{ième}}$ colonne de A . L'erreur d'estimation à chaque échantillon de longueur d'onde n , pour une colonne donnée, est déterminée en sélectionnant les intensités dont les probabilités associées sont égales à $\max(f_{\omega_\ell, n})/2$. On définit donc l'intervalle d'erreur $[\alpha_\ell(n), \beta_\ell(n)]$ de $\hat{a}_\ell(n)$ tel que :

$$f_{\omega_\ell, n}(\hat{a}_\ell(n) - \alpha_\ell(n)) = f_{\omega_\ell, n}(\hat{a}_\ell(n) + \beta_\ell(n)) = \frac{1}{2} \max(f_{\omega_\ell, n}). \quad (3.13)$$

Nous illustrons cette procédure sur la Figure 3.1 montrant un exemple de PDF annotée avec les différents points caractéristiques précédemment définis.

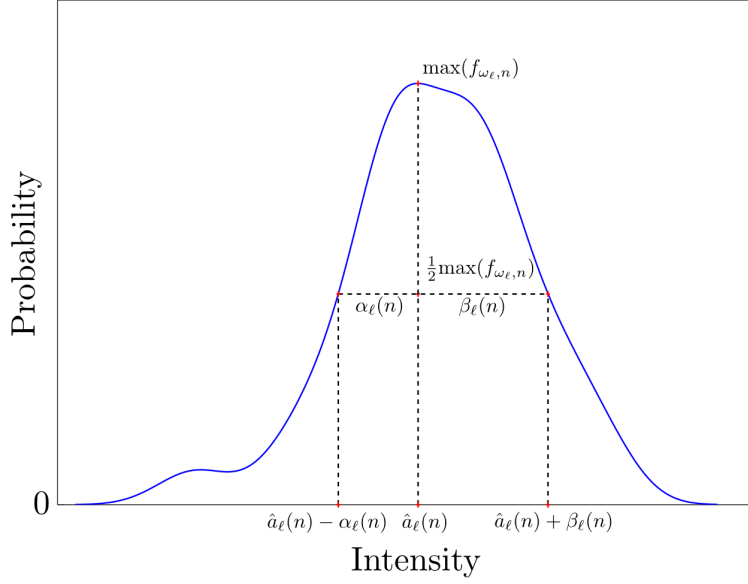


FIGURE 3.1 – Densité de probabilité $f_{\omega_\ell, n}$ des intensités de la classe ω_ℓ pour une longueur d'onde n donnée.

3.2.2.3 Reconstruction des sources

L'étape finale de la méthode MC-NMF consiste à estimer les L sources spatiales à partir des spectres élémentaires et des observations, sous la contrainte de non négativité. Cette procédure est identique à celle utilisée pour la méthode SpaceCORR détaillée dans précédemment. Le lecteur peut se reporter à la Section 3.2.1.3 illustrant l'utilisation de l'algorithme NNLS [88] dans notre contexte.

En pratique, l'algorithme de MC-NMF se résume donc à :

Entrées : X l'ensemble des observations, L le nombre de sources.

Sorties : A les spectres élémentaires, S les cartes sources.

1. NMF :
 - Initialisation aléatoire de A et S .
 - Mise à jour de A et S suivant les règles multiplicatives Eq. (3.8) et (3.9). A chaque itération, les colonnes de A sont normalisées suivant Eq. (3.10).
 - Arrêt des mises à jour lorsque le critère Eq. (3.11) est vérifié.
2. L'étape 1 est répétée K fois. On obtient finalement $K \times L$ spectres élémentaires.
3. Classification de l'ensemble des spectres élémentaires estimés en L clusters avec un algorithme de k-means.
4. Pour chaque cluster d'indice ℓ , l'estimation de l'intensité la plus probable à chaque longueur d'onde permet de construire le spectre élémentaire \hat{a}_ℓ représentatif du cluster suivant Eq. (3.12). Les barres d'erreurs de cette estimation sont déduites avec Eq. (3.13).
5. Reconstruction des sources S par minimisation du critère Eq. (3.6) (NNLS).

3.2.3 Les méthodes hybrides

Dans des conditions idéales, la méthode SpaceCORR donne une décomposition parfaite du cube de données. On entend par conditions idéales le fait que les données présentent des zones strictement mono-sources (*i.e.* $q_Z = 1$) et que les données ne sont pas bruitées. En pratique, la présence de zones parfaitement mono-sources peut ne pas être réaliste. Dans de telles conditions, les zones Z retenues pour l'estimation de la matrice de mélange A peuvent être contaminées par la présence, faible mais non négligeable, d'une ou plusieurs autres sources et / ou de bruit. Dans ce cas, la décomposition obtenue par SpaceCORR n'est pas idéale mais donne une bonne approximation des "vraies" sources ainsi que de leurs coefficients de mélange associés.

Pour améliorer la décomposition du cube de données, ces approximations sont affinées en initialisant la MC-NMF avec les spectres \hat{A} ou les cartes d'abondance \hat{S} obtenues avec SpaceCORR. Ainsi, le point de départ de la NMF est proche du minimum global de la fonction de coût Eq. (3.7) à optimiser, ce qui réduit le risque que la NMF converge dans un minimum local. De plus, cette méthode d'initialisation réduit l'ensemble des solutions possibles de la NMF, ce qui réduit la dispersion des solutions de la MC-NMF (les barres d'erreur de l'analyse MC définies précédemment sont réduites).

Par ailleurs, on notera qu'initialiser la NMF avec à la fois les spectres et les cartes présente peu d'intérêt. D'une part les résultats obtenus sont identiques à ceux obtenus en initialisant la NMF uniquement avec les cartes et d'autre part cela supprime l'analyse MC dans la chaîne de traitement. Ainsi, lors de l'initialisation de la NMF, une des deux matrices A ou S est initialisée avec l'estimation correspondante obtenue avec SpaceCORR. Les coefficients de la seconde matrice sont alors générés suivant une distribution uniforme sur l'intervalle $[0, 1]$.

Le choix d'initialisation par les spectres ou par les cartes sera discuté dans la Section

3.3.4. La version hybride utilisant l’initialisation par les spectres est appelée SCA-NMF-Spec en version abrégée (le nom complet étant SpaceCORR-MC-NMF-Spec). La version hybride utilisant l’initialisation par les cartes est appelée SCA-NMF-Map (pour SpaceCORR-MC-NMF-Spec).

Pour conclure, les méthodes hybrides proposées permettent une tolérance sur le critère de qualité mono-source q_Z des zones d’analyse de SpaceCORR tout en réduisant la variabilité des solutions données par la NMF.

3.3 Résultats expérimentaux sur données synthétiques

Dans cette section, nous réalisons un ensemble de tests des méthodes SpaceCORR, MC-NMF et hybrides sur des données synthétiques réalistes. Ces différents tests ont pour objectif de quantifier les performances des méthodes en fonction du rapport signal sur bruit (SNR pour *Signal to Noise Ratio* en anglais), du taux de parcimonie conjointe des données ou encore d’évaluer la dispersion des solutions obtenues par la MC-NMF et par les méthodes hybrides.

3.3.1 Construction des données synthétiques réalistes

Pour évaluer la qualité des résultats de nos méthodes, nous construisons un ensemble de cubes hyperspectraux représentatifs de notre contexte astrophysique. Les données synthétiques que nous utilisons dans nos différents tests modélisent les données HIFI-Herschel, *i.e.* chaque spectre élémentaire ne contient qu’une unique raie d’émission. Les cubes de données simulés sont de dimensions $100 \times 100 \times 300$, *i.e.* chacune des 300 bandes spectrales contient 100×100 pixels, et est composée de 2, 4 ou 6 sources.

3.3.1.1 Modélisation des spectres élémentaires

Les raies d’émission observées par le spectromètre HIFI-Herschel (voir Figure 2.10) possèdent deux particularités qui sont la conséquence des conditions physiques régnant dans le nuage de gaz.

La première est l’étalement spectral de la raie observée selon une distribution gaussienne des fréquences. Cet étalement est dû majoritairement, à la température, aux turbulences du nuage de gaz ainsi qu’à la PSF (pour *Point Spread Function* en anglais) de l’instrument.

La seconde particularité est le décalage en fréquence de la raie observée. Ce décalage par effet Doppler provient de la dynamique du nuage de gaz. En effet différentes régions du nuage sont en mouvement par rapport à l’observateur et donc les fréquences observées sont décalées par rapport aux fréquences émises. Le décalage en fréquence de la raie d’émission constitue d’ailleurs le paramètre principal permettant de différencier deux spectres élémentaires. Pour plus de détails sur les propriétés physiques des observations, le lecteur pourra consulter [132].

Les spectres élémentaires sont simulés par des fonctions gaussiennes normalisées (*i.e.* qui s’intègrent à 1) de même largeur σ_{Spec} (le cas de largeurs différentes pour chaque gaussienne a été étudié et donne des résultats similaires). Pour obtenir les différents spectres élémentaires présents dans les données, nous faisons varier la position de la gaussienne sur l’axe spectral.

Ainsi nous simulons le décalage Doppler spécifique à chaque source. La Figure 3.2 montre les spectres élémentaires utilisés dans les différents cubes de données pour les mélanges de 2, 4 et 6 sources. On notera que les gaussiennes utilisées sont recouvrantes.

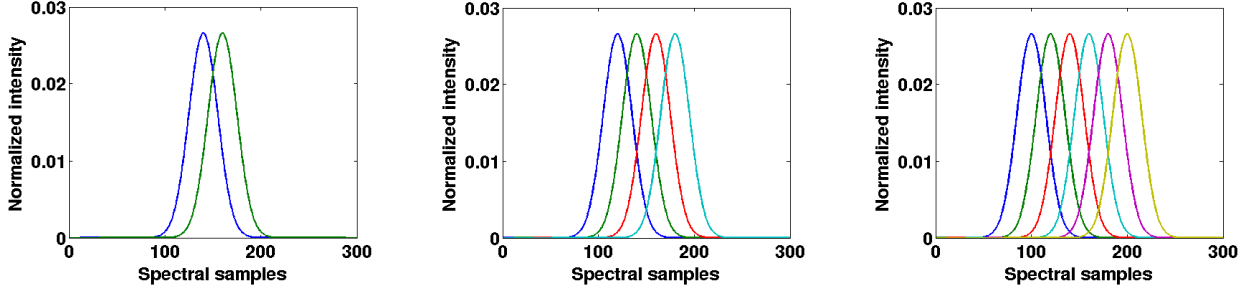


FIGURE 3.2 – Spectres élémentaires utilisés dans les différents cubes de données synthétiques contenant respectivement 2, 4 ou 6 sources.

3.3.1.2 Modélisation des cartes d’abondance

Sous l’effet du rayonnement UV, le nuage de gaz observé est structuré en strates. Dans le cas des données IRS-Spitzer, chaque strate du nuage est caractérisée par la présence d’une population spécifique de poussières (voir les Sections 2.2.2 et 2.6.2.1, ainsi que [132]). Dans le cas des données HIFI-Herschel, la stratification du nuage de gaz est la conséquence d’un autre phénomène physique : sous l’effet du rayonnement UV, on observe une photoévaporation du nuage. Ainsi, suivant la géométrie du nuage de gaz et de l’extinction du rayonnement UV par le gaz, chaque strate est animée d’un mouvement qui lui est propre. La direction de photoévaporation est normale à la surface du nuage et son intensité dépend de la profondeur dans le nuage de gaz. Cette situation est illustrée sur la Figure 3.3.

Bien que les strates du nuage de gaz aient des origines différentes selon les données considérées, on observe dans les deux cas une parcimonie conjointe des sources spatiales. Dans le cas des données HIFI-Herschel, le décalage Doppler de la raie observée varie suivant la position spatiale dans la nébuleuse. On modélise chaque strate du nuage de gaz par une fonction gaussienne en 2 dimensions (2D). Chaque gaussienne est normalisée et a la même largeur σ_{Map} suivant les axes x et y . On définit la zone d’influence d’une source spatiale (*i.e.* la zone pour laquelle la source est considérée active) par les pixels situés entre le pic de la fonction gaussienne 2D et une distance de $3\sigma_{Map}$. Au delà de cette distance, la source est considérée comme négligeable. La parcimonie spatiale conjointe est simulée en faisant varier la position de chaque source spatiale. Le degré de parcimonie conjointe dépend donc de la position de chaque source, la distance d entre deux pics de fonctions gaussiennes 2D voisines variant de $6\sigma_{Map}$ à $2\sigma_{Map}$ avec un pas de $1\sigma_{Map}$. Pour alléger les notations, on omettra le “ σ_{Map} ” à chaque mention de d . Le cas extrême $d = 2$ contient toujours des zones mono-sources pour chaque source pour rester dans les conditions d’application de SpaceCORR. La Figure 3.4 montre les positions de chaque source spatiale dans les deux cas extrêmes en terme de degré de parcimonie conjointe, *i.e.* $d = 2$ et $d = 6$. De plus, afin d’éviter les variations cohérentes entre les intensités de deux sources spatiales, chaque carte d’abondance

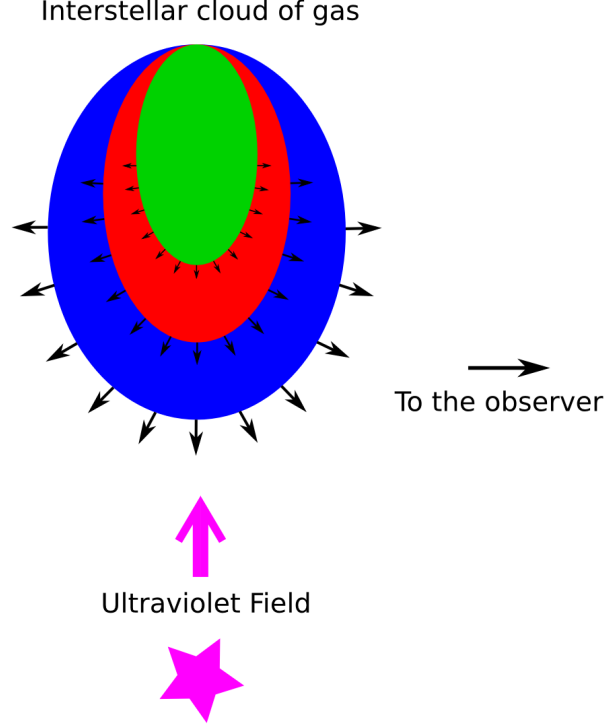


FIGURE 3.3 – Illustration de la photoévaopration du nuage de gaz sous l’effet du rayonnement UV. La direction et l’intensité de la photoévaporation constituent les paramètres discriminant les spectres élémentaires.

est légèrement perturbée par un bruit multiplicatif uniforme sur l’intervalle $[0, 0.1]$. Ainsi la symétrie des scènes modélisées n’entraîne pas de relation linéaire entre les différentes cartes.

Pour finir, on ajoute à chaque cube défini précédemment un bruit blanc gaussien de manière à obtenir un SNR de 10, 20 ou 30 dB. On dispose donc au final de 45 images hyperspectrales (3 nombres de sources différents \times 5 positions des sources spatiales \times 3 niveaux de bruit), chacune ayant des propriétés de parcimonie un nombre de sources et un SNR distinct.

3.3.2 Mesures de performances

Pour quantifier les performances des méthodes que nous proposons dans ce manuscrit, nous utilisons les deux critères distincts suivants. Chacun de ces critères est applicable uniquement sur des données synthétiques. On précise que ces critères sont appliqués après correction des permutations des sources induites par la SAS. Les spectres élémentaires estimés par chacune de nos méthodes sont systématiquement normalisés (tel que $\sum_{n=1}^N a_\ell(n) = 1$) avant la reconstruction des sources. Ainsi l’indétermination d’échelle propre à la SAS est fixée pour permettre une comparaison cohérente avec les données synthétiques. Notons qu’il existe d’autres critères de performances que ceux mentionnés ci-dessous. Le lecteur pourra

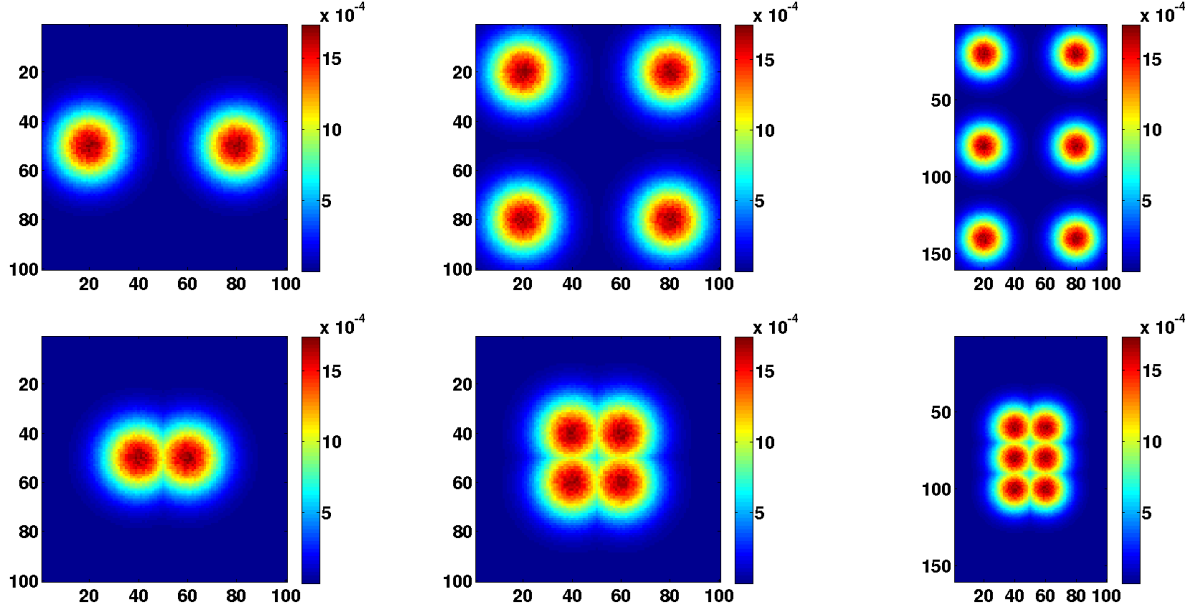


FIGURE 3.4 – Positions des sources spatiales utilisées pour la construction des cubes hyper-spectraux contenant 2, 4 et 6 sources. La ligne du haut montre le cas sans recouvrement des sources ($d = 6\sigma_{Map}$) et la ligne du bas montre le cas avec un recouvrement maximum ($d = 2\sigma_{Map}$). Les cas intermédiaires ne sont pas représentés.

consulter [135] pour un exemple de critères utilisés en SAS pour des signaux audio.

3.3.2.1 Mesure d'erreur pour les cartes d'abondance

La comparaison d'une carte d'abondance estimée \hat{s}_ℓ avec la carte correspondante s_ℓ utilisée pour synthétiser le mélange est réalisée avec la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne normalisée NRMSE (pour *Normalized Root Mean Square Error* en anglais) :

$$\text{NRMSE}_\ell = \frac{\|s_\ell - \hat{s}_\ell\|_2}{\|s_\ell\|_2}. \quad (3.14)$$

Cette mesure d'erreur standard exprimée en pourcentage vaut 0 pour deux cartes identiques. A partir de cette mesure, on définit l'erreur totale d'estimation des cartes :

$$\text{NRMSE} = \text{mean}_\ell \{\text{NRMSE}_\ell\}. \quad (3.15)$$

3.3.2.2 Mesure d'erreur pour les spectres élémentaires

La comparaison d'un spectre élémentaire estimé \hat{a}_ℓ avec le spectre correspondant a_ℓ utilisé pour synthétiser le mélange est réalisée avec l'angle spectral SAM (pour *Spectral Angle Mapper* en anglais). Cette mesure usuelle en imagerie hyperspectrale est définie comme l'angle formé par les deux spectres :

$$\text{SAM}_\ell = \arccos \left(\frac{\langle a_\ell, \hat{a}_\ell \rangle}{\|a_\ell\| \cdot \|\hat{a}_\ell\|} \right), \quad (3.16)$$

où $\langle ., . \rangle$ définit le produit scalaire. Cette mesure exprimée en radian vaut 0 pour deux spectres identiques. A partir de cette mesure, on définit l'erreur totale d'estimation des spectres :

$$\text{SAM} = \text{mean}_{\ell} \{ \text{SAM}_{\ell} \}. \quad (3.17)$$

3.3.2.3 Mesure de la dispersion des solutions de la MC-NMF

L'analyse Monte Carlo associée à la NMF permet de définir la dispersion des solutions données par chacune des K répétitions de la NMF. Pour chaque source estimée, on construit ainsi l'enveloppe donnant la dispersion des solutions autour de la solution la plus probable suivant l'équation (3.13). On normalise l'amplitude de l'enveloppe par l'intensité maximale afin d'obtenir les barres d'erreur en pourcentage du maximum d'intensité. Cette normalisation est arbitraire et permet d'exprimer la dispersion de la MC-NMF indépendamment de l'intensité spectrale. On note NMCEB_{ℓ} (pour Normalized Monte Carlo Error Bar) l'erreur normalisée associée au $\ell^{\text{ième}}$ spectre élémentaire :

$$\text{NMCEB}_{\ell}(n) = \frac{\alpha_{\ell}(n) + \beta_{\ell}(n)}{U_{\ell}} \quad \forall n \in \{1, \dots, N\}, \quad (3.18)$$

où $U_{\ell} = \max_n \{a_{\ell}(n)\}$ est l'intensité maximale du $\ell^{\text{ième}}$ spectre élémentaire. Pour illustrer cette mesure, on représente sur la Figure 3.5, un exemple de spectre estimé et d'enveloppe de dispersion donnée par la MC-NMF.

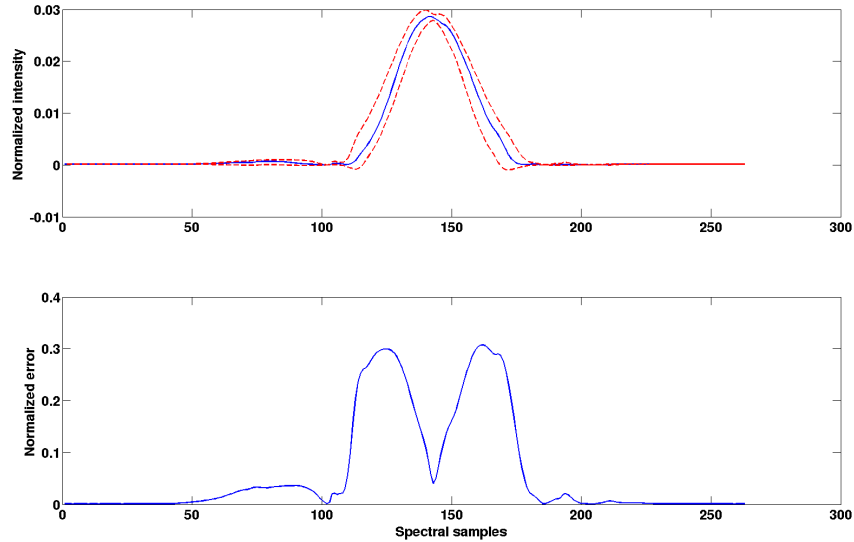


FIGURE 3.5 – Illustration de la mesure de dispersion de la NMF. La figure du haut montre un spectre estimé par la MC-NMF (en bleu) ainsi que son enveloppe de dispersion (en rouge). La figure du bas montre l'amplitude de l'enveloppe exprimée en pourcentage du maximum de l'intensité spectrale.

Pour quantifier la dispersion totale des solutions de la MC-NMF pour un cube de données, la mesure précédente est moyennée suivant l'axe spectral :

$$\text{NMCEB}_\ell^{\text{mean}} = \text{mean}_n\{\text{NMCEB}_\ell(n)\}, \quad (3.19)$$

puis suivant les sources dans un second temps :

$$\text{NMCEB}^{\text{mean}} = \text{mean}_\ell\{\text{NMCEB}_\ell^{\text{mean}}\}. \quad (3.20)$$

On associe à la dispersion totale moyenne définie précédemment, une version donnant la dispersion maximale suivant l'axe spectral :

$$\text{NMCEB}_\ell^{\text{max}} = \max_n\{\text{NMCEB}_\ell(n)\}. \quad (3.21)$$

puis suivant les sources :

$$\text{NMCEB}^{\text{max}} = \max_\ell\{\text{NMCEB}_\ell^{\text{max}}\}. \quad (3.22)$$

3.3.3 Performances des méthodes

Chacune des quatre méthodes décrites précédemment (SpaceCORR Section 3.2.1, MC-NMF Section 3.2.2, SCA-NMF-Spec et SCA-NMF-Map Section 3.2.3) est appliquée sur l'ensemble des cubes synthétiques. Pour chaque cube, 100 réalisations de bruit sont effectuées. Afin de simplifier la représentation des résultats, nous montrons dans la suite uniquement les critères de performances atteints par les méthodes, auxquels nous associons un cas pratique montrant deux exemples de spectres et de cartes d'abondance estimés. Le premier exemple illustre le cas idéal de données fortement parcimonieuses ($d = 6$) et l'autre illustre le cas le plus défavorable ($d = 2$). Le cas pratique utilisé pour illustrer les résultats est toujours le même quel que soit la méthode utilisée, ceci pour faciliter les comparaisons des différentes méthodes. Il s'agit de la seconde source du cube contenant 4 sources et un SNR de 20 dB.

En ce qui concerne le SAM et le NRMSE présentés sur les figures suivantes, ils sont obtenus en moyennant les SAM et NRMSE mesurés pour chaque méthode à chaque réalisation de bruit. On y associe une barre d'erreur donnant l'écart type suivant les réalisations de bruit. Concernant les mesures de dispersion NMCEB (moyenne ou maximale), elles sont obtenues en deux temps. Dans un premier temps, on définit pour chaque source le spectre moyen et l'enveloppe moyenne suivant les réalisations de bruit. Dans un second temps, on réalise les agrégations (moyenne ou maximum) suivant l'axe spectral (n), puis suivant les sources (ℓ) comme défini dans la section précédente.

Pour résumer, on associe à chaque méthode une figure composée de six cadrants disposés en deux lignes et trois colonnes. La première ligne donne le SAM et la seconde le NRMSE. La première colonne concerne les cubes contenant 2 sources, celle du milieu ceux contenant 4 sources et la dernière ceux contenant 6 sources.

Au sein de chaque cadrant, l'axe des abscisses donne la distance d définissant le recouvrement des sources spatiale, de $d = 6$ à $d = 2$ (sens de variation décroissant). Les trois courbes

représentent chacun des trois niveaux de bruit testés dans cette étude à savoir : bleue pour 30 dB, rouge pour 20 dB et noire pour 10 dB.

Pour la méthode MC-NMF et les méthodes hybrides, on ajoute une figure composée de 6 cadran disposés comme précédemment donnant la mesure de dispersion NMCEB. La ligne du haut illustre le $\text{NMCEB}^{\text{mean}}$ et la ligne du bas le $\text{NMCEB}^{\text{max}}$ pour chacun des 45 cubes.

En conclusion, l’ensemble de ces tests et illustrations vise à quantifier plusieurs phénomènes. Tout d’abord, évaluer l’impact du niveau de bruit et de la distance entre les sources sur les performances des méthodes. Ensuite, quantifier l’apport des méthodes hybrides par rapport aux méthodes SpaceCORR et MC-NMF appliquées séparément. L’étude des barres d’erreur de l’analyse Monte-Carlo associées à la NMF permet d’évaluer la dispersion des solutions données par la MC-NMF en fonction du niveau de bruit, de la parcimonie des sources et de l’initialisation.

En amont de ces tests, nous avons testé sur l’ensemble des cubes la méthode d’estimation du nombre de sources décrite dans la Section 1.3.1. Dans chaque cas, la méthode estime correctement le nombre de sources. Ces résultats sont sans ambiguïté car la séparation de la courbe des valeurs propres en une partie signal Ω_S et une partie bruit Ω_E apparaît clairement, comme illustré sur la Figure 1.2, page 12. Ces résultats sont sans surprise car les performances de ces méthodes sont directement liées à la nature du bruit, blanc additif gaussien, et un SNR suffisamment élevé dans nos simulations.

3.3.3.1 SpaceCORR

Les performances globales atteintes par SpaceCORR sont montrées sur la Figure 3.6.

Parcimonie Les résultats de SpaceCORR selon le degré de parcimonie présente dans les données sont sans équivoque. On observe les mêmes tendances quel que soit le nombre de sources ou le niveau de bruit. Dans les cas les plus favorables ($d = 6$ à $d = 4$), les performances de SpaceCORR sont excellentes, le SAM est inférieur à 0,025 rad pour des niveaux de bruit de 30 et 20 dB et inférieur à 0.06 rad pour 10 dB de bruit. Dans le même temps, le NRMSE est respectivement inférieur à 5 % et inférieur à 12 %.

On remarque une légère dégradation des performances pour une distance $d = 3$, puis une rupture significative apparaît pour $d = 2$. Dans ce dernier cas, la méthode est à la limite de l’échec pour le cube contenant 6 sources et 10 dB de bruit. Pour les mélanges de 2 sources, on observe une augmentation du SAM de 0,08 rad et du NRMSE de 10 % entre $d = 3$ et $d = 2$. Les cas des mélanges de 4 ou 6 sources sont similaires avec une augmentation du SAM respectivement de 0,13 et 0,19 rad selon le niveau de bruit et une augmentation de NRMSE respectivement de 15 % et 28 % entre $d = 3$ et $d = 2$. On notera cependant que même dans cette situation extrême de faible degré de parcimonie ($d = 2$), l’extraction des sources reste acceptable pour un mélange de 2 sources avec de “faibles” niveaux de bruit.

Nombre de sources On remarque que dans ces tests les performances de SpaceCORR se dégradent peu en fonction du nombre de sources lorsqu’elle est appliquée dans des conditions idéales (entre $d = 6$ et $d = 3$). Dans ces conditions lorsque l’on passe de 2 à 4 sources, le

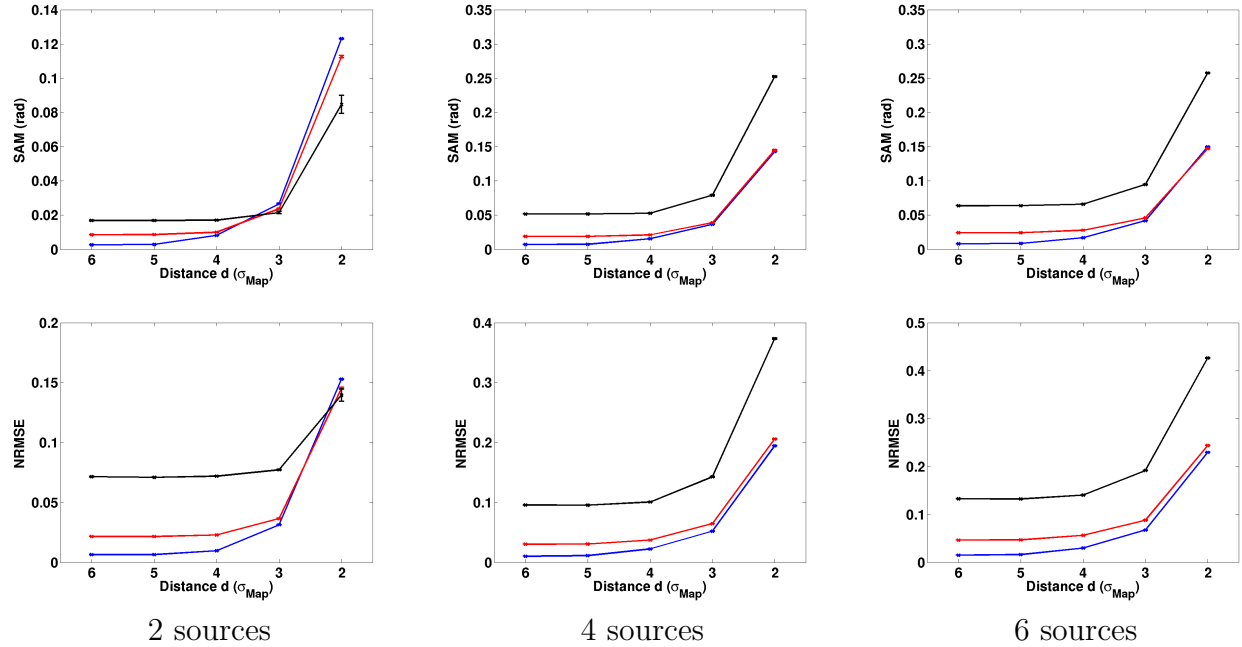


FIGURE 3.6 – Performances atteintes par SpaceCORR sur les 45 cubes synthétiques avec 100 réalisations de bruit avec un SNR de 30 dB (en bleu), 20 dB (en rouge) et 10 dB (en noir). Les barres d’erreur donne l’écart type suivant les 100 réalisations de bruit.

SAM augmente de 0,03 rad et le NRMSE de 2,5 % pour les mélanges avec 10 dB de bruit. Lorsque l’on passe de 4 à 6 sources, le SAM augmente de 0,01 et le NRMSE de 2 % pour les mélanges avec 10 dB de bruit.

En revanche pour $d = 6$, lors du passage de 2 à 4 sources on observe une chute significative des performances avec un SAM augmentant de 0,15 rad et un NRMSE de 20 % à 10 dB. Lors du passage de 4 à 6 sources, les performances diminuent moins brutalement, le SAM reste identique et le NRMSE augmente de 5 %.

Niveau de bruit On observe que SpaceCORR est relativement robuste aux niveaux de bruit les plus raisonnables. En effet pour les mélanges contenant 20 ou 30 dB de bruit, les performances sont quasiment identiques. En revanche, on note une dégradation plus conséquente lorsque l’on passe de 20 à 10 dB avec un SAM augmentant de 0,03 rad et un NRMSE de 5 à 10 % dans les cas les plus favorables. De nouveau cette tendance s’accroît dans le cas le moins favorable ($d = 2$) avec une augmentation du SAM de 0.10 rad et du NRMSE de 20 %.

En ce qui concerne les 100 réalisations de bruit, on observe une très grande stabilité des résultats avec des barres d’erreur négligeables, mis à part pour le cube contenant 2 sources, un SNR de 10 dB et $d = 2$. Dans ce derniers cas, un écart type de 5,0e-3 rad pour le SAM et de 0,5 % pour le NRMSE apparaît, ce qui reste faible au regard des performances atteintes par SpaceCORR dans ces conditions.

Cas pratique Avant de faire le bilan des performances globales de SpaceCORR dans notre contexte, on illustre concrètement ces résultats par un cas pratique (le cube contenant 4 sources et un SNR de 20 dB). On montre sur la Figure 3.7 la seconde source dans les deux positions extrêmes $d = 6$ et $d = 2$. Le Tableau 3.1 donne les différentes mesures obtenues pour cette source en particulier. Les tendances que nous pointons dans cet exemple sont valables pour les autres cubes synthétiques.

Avant toute chose, on remarque que les critères de performances sont plus élevés dans ce cas précis, ceci étant dû aux différentes moyennes (suivant les réalisations de bruit et les sources) utilisées afin d’obtenir les résultats globaux précédents.

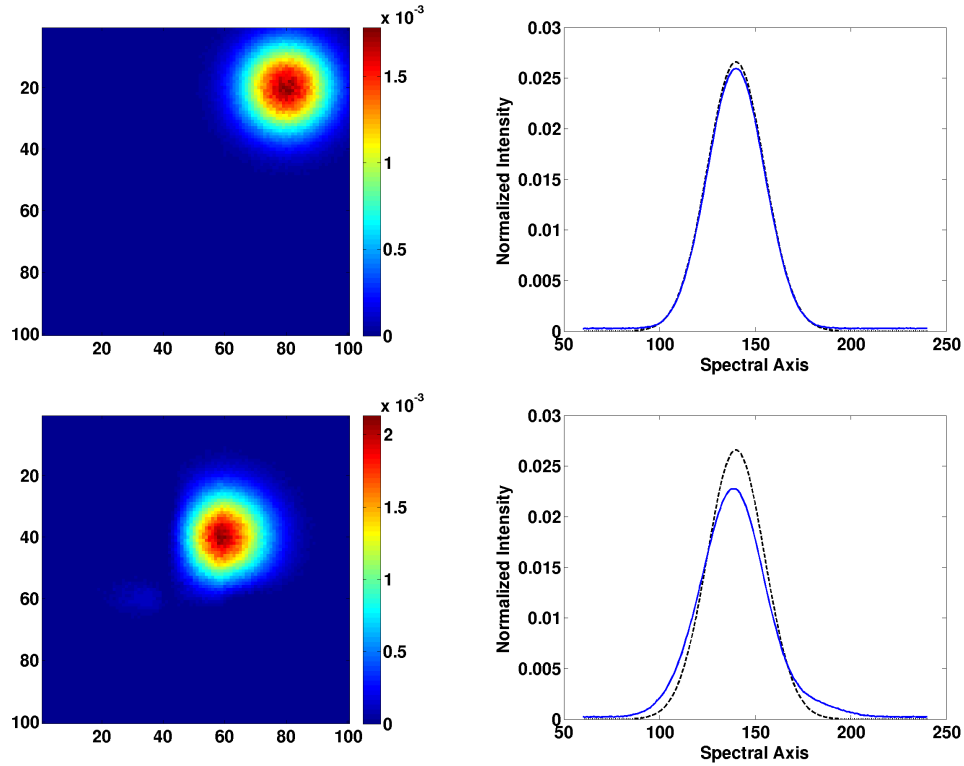


FIGURE 3.7 – Exemple de résultats obtenus par SpaceCORR dans le cas le plus parcimonieux (ligne du haut) et le moins parcimonieux (ligne du bas). Le spectre estimé est en bleu et le spectre de référence est en tirets noirs.

	$d = 6\sigma_{Map}$	$d = 2\sigma_{Map}$
$\text{NRMSE}_{\ell=2}$	2,7 %	19,8 %
$\text{SAM}_{\ell=2}$ (rad)	0,019	0,121

TABLE 3.1 – Mesures de performances associées aux résultats obtenus par SpaceCORR sur le cas pratique ($2^{\text{ième}}$ source du cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB).

Dans le cas le plus favorable ($d = 6$), le résultat de la décomposition est excellent, ce cas étant dans des conditions idéales de parcimonie. Le NRMSE obtenue est de 2,7 % et le SAM est de 0,019 rad. Visuellement, on remarque que le pic d'intensité du spectre est légèrement sous estimé.

Le cas le moins favorable ($d = 2$) est à la limite d'application de SpaceCORR. On observe que le spectre estimé n'est pas élémentaire mais est contaminé par le résidu des autres composantes présentes dans le mélange. On notera que la raie estimée est asymétrique, le résidu sur la partie droite de la raie est plus conséquent. L'élargissement de la raie estimée entraîne une sous-estimation du pic d'intensité à cause de la normalisation. Sur la carte d'abondance associée, on remarque plusieurs effets. Tout d'abord on n'observe pas de résidu d'autres composantes du mélange, à quelques artefact près. La forme de la source spatiale est irrégulière et son intensité est surestimée.

Concernant le bruit, nous avons mentionné précédemment le fait que SpaceCORR donne de bonnes performances en présence d'un bruit raisonnable. Cette observation se confirme ici puisque les spectres obtenus sont lisses malgré un SNR de 20 dB. Le bruit est atténué par SpaceCORR lors de la phase de classification des colonnes potentielles estimées, l'agrégation des colonnes relatives à la même source ayant un effet moyennneur sur un bruit blanc.

Bilan En résumé, SpaceCORR donne d'excellents résultats si les données sont suffisamment parcimonieuses, *i.e.* s'il y a un nombre suffisant de zones mono-sources. On note d'ailleurs que SpaceCORR est peu sensible au nombre de sources pour les mêmes raisons, le degré de parcimonie étant en partie lié au nombre de sources dans les données. Enfin, nous avons souligné que SpaceCORR est relativement robuste au bruit dans les données.

La présence de résidu dans les estimations issues des cas les moins parcimonieux est due au faible nombre de zones mono-sources par source dans les données. De plus, l'étape de détection des zones mono-sources est sensible aux choix du seuil utilisé pour sélectionner les meilleures zones mono-sources. Suivant ce seuil, des zones quasiment mono-sources peuvent être utilisées pour estimer les colonnes de la matrice de mélange et donc introduire des contributions issues d'autres sources. Cependant la sensibilité de la méthode au choix de ce paramètre sera atténuée par l'hybridation avec la MC-NMF.

Par ailleurs, on souligne que les valeurs prises par les différentes mesures de qualité sont assez élevées par rapport aux valeurs habituellement mesurées dans d'autres domaines d'application. Par exemple dans le cas pratique, le SAM est assez modéré avec 0.121 rad dans le pire cas, ce qui reste encore acceptable en terme de qualité d'estimation. En revanche, le NRMSE quant à lui atteint une valeurs conséquente (19,8 %). Cette valeur est cependant à prendre avec précautions. Comme nous l'avons mentionné précédemment, les résultats sont visuellement cohérents et acceptables surtout en considérant le niveau élevé de bruit (20 dB). Le NRMSE conséquent provient de la sous-estimation globale de l'intensité d'émission. En conclusion, ces mesures sont davantage utilisées comme éléments de comparaison entre les différentes méthodes proposées, que comme une mesure absolue d'acceptation ou de rejet des résultats.

3.3.3.2 MC-NMF

Les performances globales atteintes par MC-NMF sur les 45 cubes avec pour chacun, 100 réalisations de bruit, sont montrées sur la Figure 3.8.

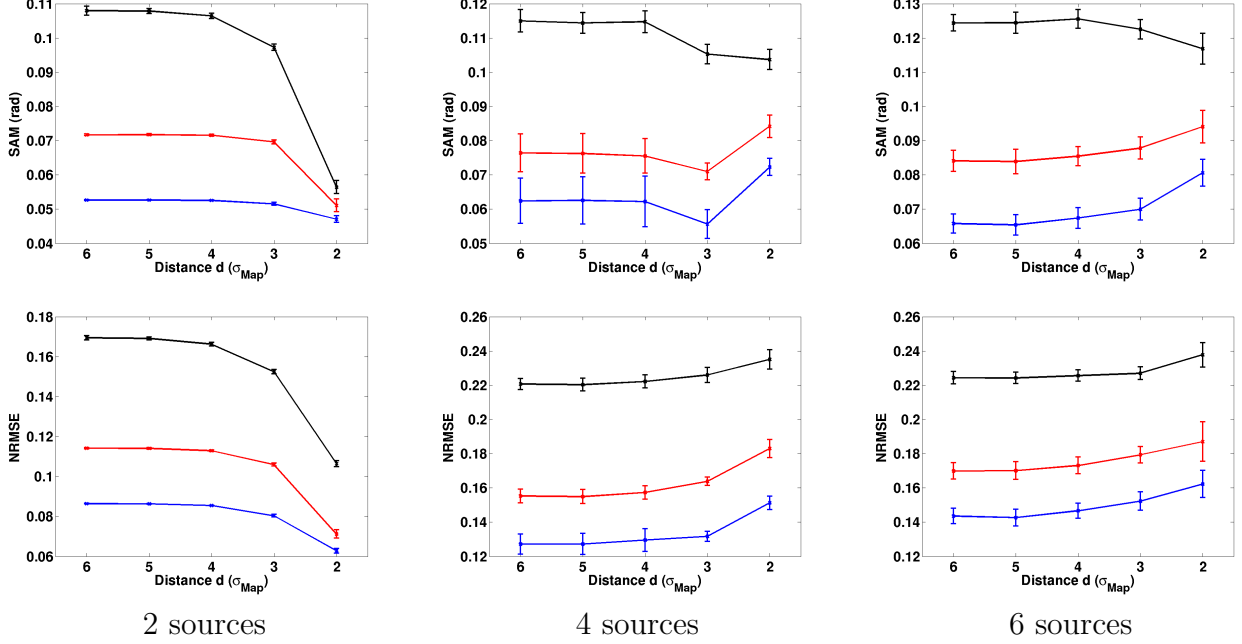


FIGURE 3.8 – Performances atteintes par la MC-NMF sur les 45 cubes synthétiques pour les 100 réalisations de bruit avec un SNR de 30 dB (en bleu), 20 dB (en rouge) et 10 dB (en noir). Les barres d'erreur donne l'écart type suivant les 100 réalisations de bruit.

Parcimonie En ce qui concerne le critère de parcimonie, les résultats sont mitigés. Pour l'ensemble des mélanges contenant 4 ou 6 sources, on obtient une tendance en accord avec l'intuition. En effet, les performances de la MC-NMF diminuent lorsque la distance d séparant les sources diminue. Cette tendance reste faible avec une augmentation du NRMSE au maximum de 2,5 % entre $d = 6$ et $d = 2$. Dans le même cas, le SAM augmente de 0,01 rad. On notera que dans le cas d'un SNR = 10 dB, cette tendance est inversée, avec une diminution du SAM de 0,01 rad. La MC-NMF reste donc relativement stable vis à vis du degré de parcimonie présente dans les cubes contenant 4 ou 6 sources.

Le cas des cubes ayant 2 sources est, quant à lui, surprenant. En effet, l'évolution des deux mesures NRMSE et SAM est contre intuitive. Les erreurs d'estimation sont stables pour les distances allant de $d = 6$ à $d = 3$ mais diminuent brutalement pour les distances les moins favorables. Le NRMSE s'améliore de 6 % et le SAM de 0,05 rad dans le cas le plus bruité. En d'autres termes, dans cette situation plus les données sont mélangées, meilleurs sont les résultats.

Afin de comprendre les raisons de cette sensibilité à la parcimonie dans le cas d'un mélange de 2 sources, nous avons réalisé un ensemble de tests. Plusieurs causes peuvent conduire à ce résultat comme la présence de bruit, la symétrie des cartes, la grande similarité des spectres

ou encore le nombre d'itérations de la NMF, bien que toutes ces hypothèses soient communes avec les cubes contenant 4 ou 6 sources. On liste ci-après les tests effectués n'ayant conduit à aucune conclusion satisfaisante (dans chaque cas la tendance est la même que celle observée sur la première colonne de la Figure 3.8).

- Absence de bruit dans les mélanges.
- Suppression de la normalisation des spectres à chaque itération de la NMF.
- Permutation aléatoire des colonnes de X .
- Suppression de la symétrie des cartes d'abondance en déformant une Gaussienne 2D.
- Suppression de la similarité des spectres en changeant la nature de la fonction simulant la raie (fonction triangle ou carré).
- Nombre fixe d'itérations de la NMF.
- Suppression des spectres observés ayant une puissance inférieure à 90 % de la puissance maximale observée.

Toutes ces expériences avaient pour objectif de tester si la structure particulière de nos simulations ou les critères choisis pour la NMF (comme la normalisation ou le critère d'arrêt) n'avaient pas une influence sur la forme de la fonction de coût à minimiser. Le seul test effectué ayant conduit à une dégradation des performances de MC-NMF en fonction de la distance d est le suivant.

On remplace les cartes d'abondance simulées par des gaussiennes 2D par une matrice S de dimension 2×100 dont les éléments sont tirés suivant une répartition uniforme comprise entre 0,5 et 1. Les 25 premiers éléments de la première ligne sont multipliés par un coefficient α . Les éléments 26 à 50 de la seconde ligne sont également multipliés par ce même coefficient α . Ainsi, suivant la valeur de α , on simule plus ou moins de parcimonie dans les données (α joue le même rôle que d). Dans ce test, on observe une diminution des performances de la MC-NMF lorsque α augmente.

A ce jour nous n'avons pas d'explication satisfaisante pour valider la ou les raisons de ces résultats inattendus dans le cas d'un mélange de 2 sources.

Enfin, on précise que l'on a testé pour tous les cubes (ainsi que pour les méthodes hybrides présentées ci-après), le cas de parcimonie $d = 1$. On retrouve alors des performances cohérentes, *i.e.* le SAM et le NRMSE augmente considérablement pour tous les cubes et pour toutes les méthodes.

Nombre de sources On remarque que les résultats de MC-NMF se dégradent légèrement si le nombre de sources présentes dans les données augmente, ce qui est cohérent. Globalement, le SAM augmente de 0,01 lorsque l'on passe de 2 à 4 sources puis de 4 à 6 sources. Le NRMSE quant à lui augmente d'environ 4 % lorsque l'on passe de 2 à 4 sources et de 1,5 % de 4 à 6 sources.

Niveau de bruit Enfin on observe que la MC-NMF est sensible au niveau de bruit présent dans les données. En effet, lorsque le SNR passe de 30 dB à 20 dB, le NRMSE augmente de 2 à 4 % et le SAM de 0,02 rad, puis pour un SNR passant de 20 dB à 10 dB, le NRMSE augmente d'environ 5 % et le SAM de 0,04 rad. En ce qui concerne les 100 réalisations de bruit, on observe que les résultats de la MC-NMF varient d'une réalisation à l'autre. Cet effet est négligeable pour les cubes contenant 2 sources mais devient conséquent pour les mélanges

de 4 ou 6 sources, indépendamment du niveau de bruit. On observe un écart type de 0,6 % pour le NRMSE dans le pire cas et un écart type de $5,0 \times 10^{-3}$ rad pour le SAM dans le pire cas.

Barres d'erreur Pour finir, on étudie l'amplitude des barres d'erreur de l'analyse Monte Carlo associée à la NMF détaillées sur la Figure 3.9.

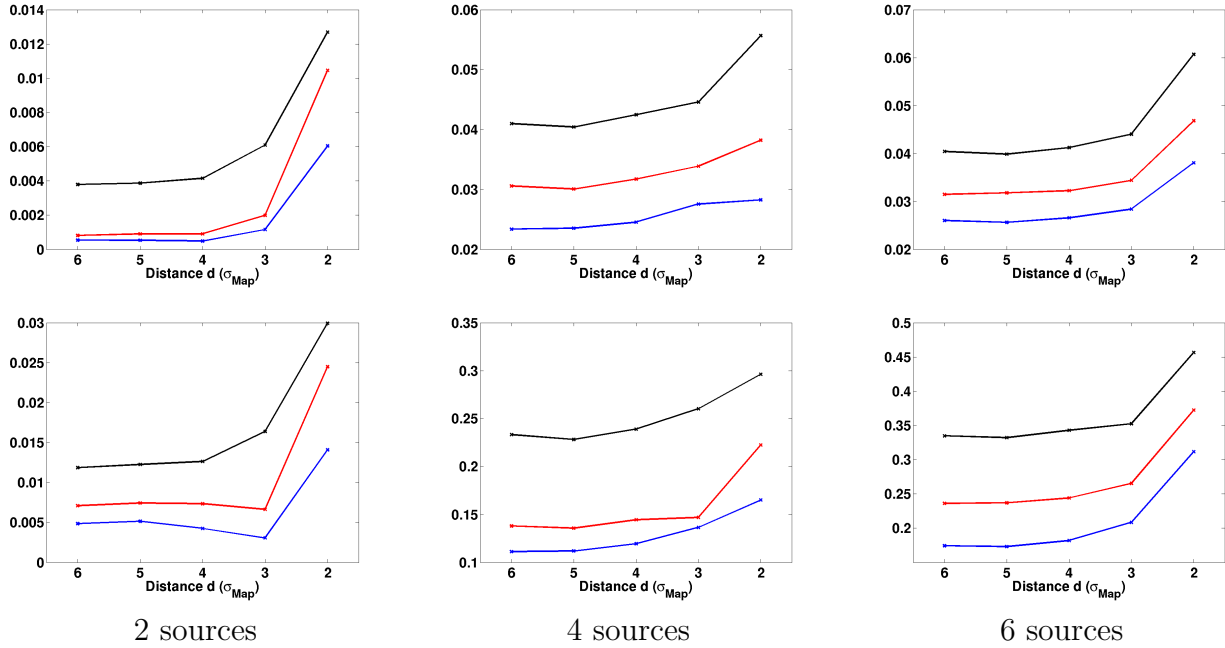


FIGURE 3.9 – Dispersion des solutions de la MC-NMF obtenues sur les 45 cubes synthétiques avec 100 réalisations de bruit. La ligne du haut illustre le $\text{NMCEB}^{\text{mean}}$ et la ligne du bas le $\text{NMCEB}^{\text{max}}$.

On remarque globalement que la variabilité des solutions de la MC-NMF augmente à la fois avec le nombre de sources, le niveau de bruit et à mesure que le taux de parcimonie diminue. Pour les mélanges de 2 sources, les barres d'erreur restent faibles avec une moyenne de 1,5 % du maximum d'intensité dans le pire cas (SNR = 10 dB et $d = 2$) pour un maximum de 3 %. Ainsi, pour 2 sources les solutions de la MC-NMF sont peu variables même dans le cas le moins favorable.

Pour les mélanges de 4 ou 6 sources, la dispersion des solutions de la MC-NMF devient non négligeable avec une moyenne de 5 % du maximum d'intensité dans le pire cas. Cependant, le maximum de l'enveloppe devient conséquent (ligne du bas de la Figure 3.9) et dépend fortement du niveau de bruit et du degré de parcimonie dans les données. On constate qu'il augmente d'une part de 10 % en moyenne entre $d = 6$ et $d = 2$, d'autre part de 3 à 5 % pour un SNR passant de 30 dB à 20 dB pour atteindre une augmentation de 10 % pour un SNR passant de 20 dB à 10 dB. Ainsi dans les cas les plus favorables, on observe des barres d'erreur pouvant atteindre 15 % du maximum d'intensité, mais pouvant atteindre 30 à 40 % dans les cas les plus défavorables.

Cas pratique Dans le but de comparer les méthodes entre elles, on représente l'estimation de la même source du même cube (4 sources et SNR = 20 dB) que dans le cas pratique précédent. On notera que la réalisation de bruit n'est pas la même que dans l'exemple proposé pour SpaceCORR. Les résultats pour les deux positions extrêmes sont montrés sur la Figure 3.10 ainsi que dans le Tableau 3.2.

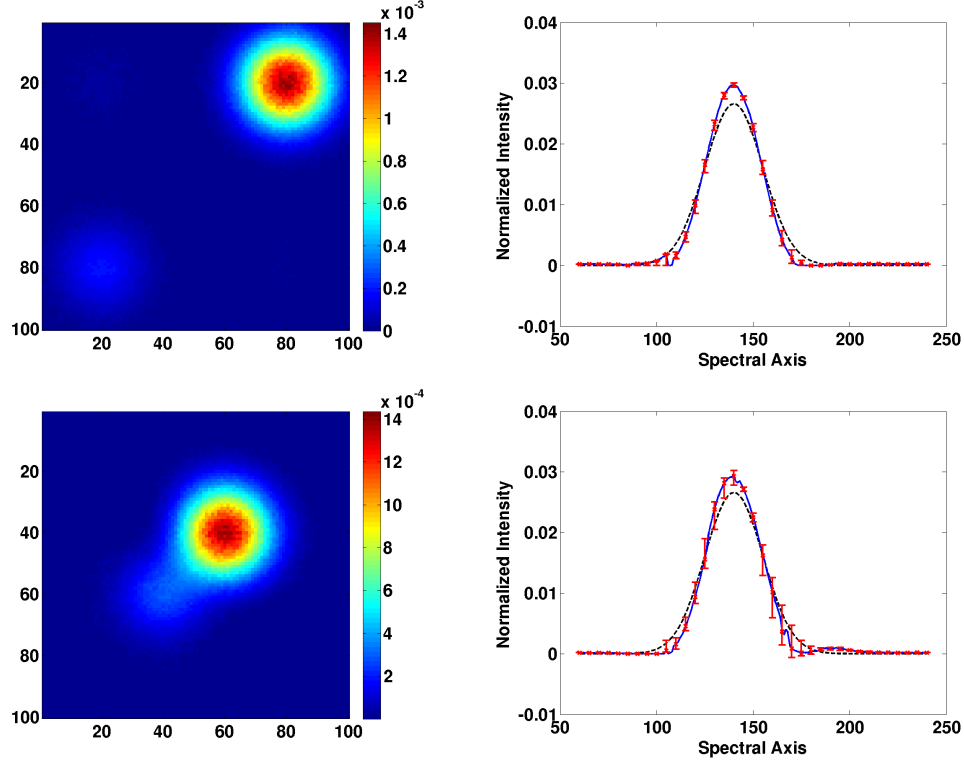


FIGURE 3.10 – Exemple de résultats obtenus par MC-NMF dans le cas le plus parcimonieux (ligne du haut) et le moins parcimonieux (ligne du bas). Le spectre estimé est en bleu et le spectre de référence est en tirets noirs. Les barres d'erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

	$d = 6\sigma_{Map}$	$d = 2\sigma_{Map}$
$\text{NRMSE}_{\ell=2}$	20,6 %	23,1 %
$\text{SAM}_{\ell=2}$ (rad)	0,108	0,107
$\text{NMCEB}_{\ell=2}^{\text{mean}}$	2,4 %	5,3 %
$\text{NMCEB}_{\ell=2}^{\text{max}}$	10,3 %	23,3 %

TABLE 3.2 – Mesures de performances associées aux résultats obtenus par la MC-NMF sur le cas pratique ($2^{\text{ième}}$ source du cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB).

Dans les deux cas représentés, on remarque que la raie estimée a une largeur plus faible que la référence, ce qui entraîne une surestimation du pic d'intensité, due à la normalisation

des spectres. On souligne que la position du pic est malgré tout correctement estimée. On note par ailleurs que le SAM est très proche dans les deux cas représentés.

Sur les cartes d'abondance, on observe la présence résiduelle d'une autre source. On remarque que cet artefact est absent sur l'estimation du spectre dans le cas le plus parcimonieux. Dans l'autre cas, on observe la présence d'un faible résidu d'une autre composante à droite du lobe. De plus cet artefact faible en intensité n'explique pas le NRMSE conséquent mesuré. La surestimation du pic d'intensité spectrale évoquée précédemment entraîne la sous-estimation de l'intensité globale au niveau de la carte d'abondance. Cette sous-estimation de l'ordre de 10 % entraîne un NRMSE élevé, 20 % et 23 % selon le cas, malgré un visuel satisfaisant.

Précédemment nous avons souligné la sensibilité de la MC-NMF au niveau de bruit. On remarque dans cet exemple que les spectres extraits sont relativement lisses au regard d'un SNR de 20 dB. L'impact du bruit est atténué lors de l'estimation des spectres par l'analyse Monte Carlo, plus particulièrement lors du choix des intensités les plus probables à chaque longueur d'onde au sein d'un même cluster obtenu par classification.

On observe également la relation entre la dispersion des solutions de la MC-NMF et le taux de parcimonie précédemment évoqué, les barres d'erreur étant plus grandes dans le cas le moins parcimonieux (Tableau 3.2). De plus on remarque qu'il y a un lien direct entre l'intensité du signal et l'amplitude des barres d'erreur. Dans le cas le plus parcimonieux, l'erreur maximale NMCEB^{\max} est de 10 % ce qui reste acceptable au regard du niveau de bruit, alors quelle atteint un maximum de 23 % dans le cas le plus défavorable.

Bilan Pour résumer, nous avons souligné que les résultats de MC-NMF sont relativement peu sensibles à la parcimonie (si l'on excepte le cas problématique des mélanges contenant 2 sources). Ce constat semble cohérent du fait que la parcimonie n'est pas prise en compte dans la MC-NMF. De même le nombre de sources est un critère ayant un effet relativement négligeable sur les performances de la MC-NMF (dans le cadre de nos simulations). Nous avons également souligné que le niveau de bruit est un paramètre ayant un effet conséquent sur la qualité des solutions données par la MC-NMF (bien que le cas non bruité ne donne pas de résultats idéaux). On notera en particulier que l'amplitude des barres d'erreur de la MC-NMF dépend de l'ensemble des paramètres testés (degré de parcimonie, nombre de sources et niveau de bruit). La variabilité des solutions de la MC-NMF est souvent conséquente et l'objectif des méthodes hybrides de réduire cette variabilité est pertinent.

3.3.3.3 SCA-NMF-Spec

Les performances globales atteintes par SCA-NMF-Spec sont montrées sur la Figure 3.11. Les résultats obtenus avec SCA-NMF-Spec suivent la même tendance quel que soit le nombre de sources présentes dans les données. On observe une évolution contre intuitive des performances en fonction de la distance d . Les courbes de performances ont la même forme que celles obtenues avec la MC-NMF seule dans le cas de deux sources.

Parcimonie Pour une distance comprise entre $d = 6$ et $d = 4$, les performances n'évoluent pas. En revanche à partir de $d = 3$, les performances s'améliorent et on observe une diminution brutale du SAM et de NRMSE pour $d = 2$. Le NRMSE s'améliore en moyenne de 5 % et le SAM de 0,5 rad entre $d = 6$ et $d = 2$.

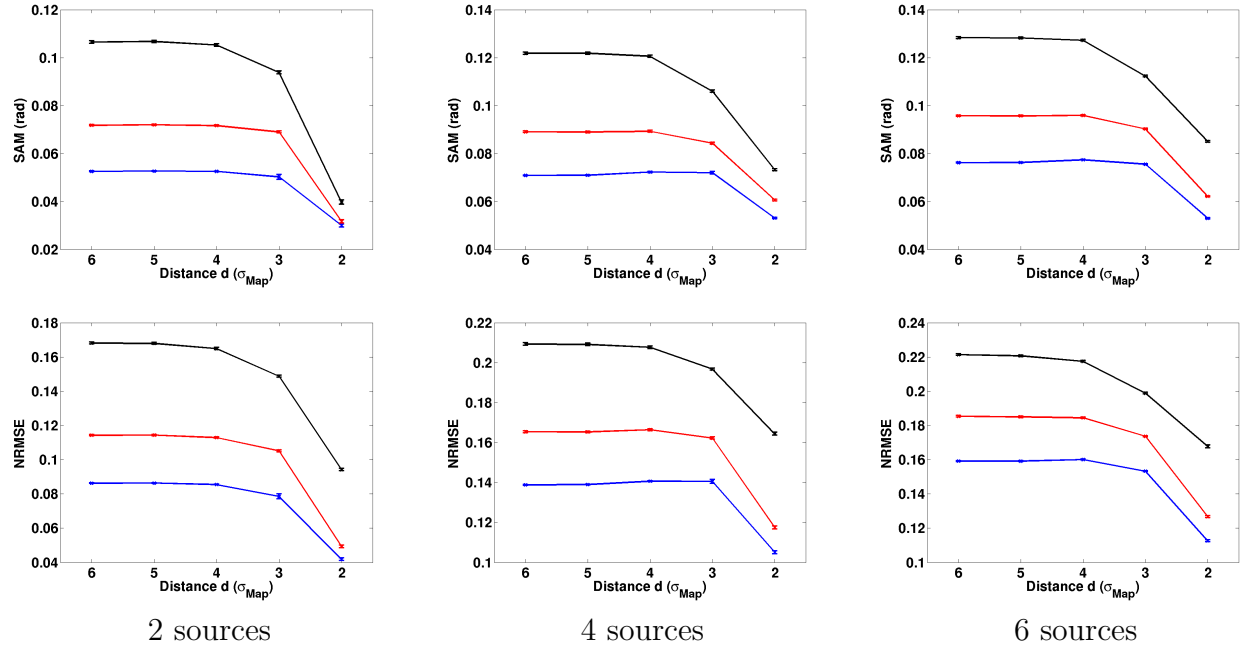


FIGURE 3.11 – Performances atteinte par SCA-NMF-Spec sur les 45 cubes synthétiques pour 100 réalisations de bruit avec un SNR de 30 dB (en bleu), 20 dB (en rouge) et 10 dB (en noir). Les barres d'erreur donne l'écart type suivant les 100 réalisations de bruit.

Nombre de sources Les performances de SCA-NMF-Spec se dégradent légèrement quand le nombre de sources augmente. Globalement, le SAM augmente de 0,01 rad lorsque l'on ajoute 2 sources et le NRMSE augmente d'environ 5 % lorsque l'on passe de 2 à 4 sources, puis il augmente d'environ 2 % lorsque l'on passe de 4 à 6 sources. On notera que l'augmentation est sensiblement la même que celle observée pour la MC-NMF seule.

Niveau de bruit On observe que SCA-NMF-Spec est sensible au niveau de bruit présent dans les données avec une dégradation notable des performances lorsque le SNR augmente. Lorsque le SNR passe de 30 dB à 20 dB, le NRMSE augmente d'environ 3 % et le SAM de 0,02 rad, puis pour un SNR passant de 20 dB à 10 dB, le NRMSE augmente d'environ 5 % et le SAM de 0,04 rad. De nouveau, on remarque que ce constat est le même que celui observé pour MC-NMF. En revanche, on remarque que SCA-NMF-Spec est très stable vis à vis des 100 réalisations de bruit. Les barres d'erreur sont à peine visibles sur la Figure 3.11 avec, dans le pire cas, un écart type de 0,14 % pour le NRMSE et 1,0e-3 rad pour le SAM.

Barres d'erreur Pour finir, on étudie l'amplitude des barres d'erreur de l'analyse Monte Carlo associée à la SCA-NMF-Spec détaillée sur la Figure 3.12.

Globalement, on observe les mêmes tendances que celles de la MC-NMF seule, la dispersion de la MC-NMF augmente avec le nombre de sources, le niveau de bruit et à mesure que le taux de parcimonie diminue. Cependant, les taux de dispersion sont nettement inférieurs à ceux de la MC-NMF seule dans tous les cas. En moyenne, la dispersion des solutions varie

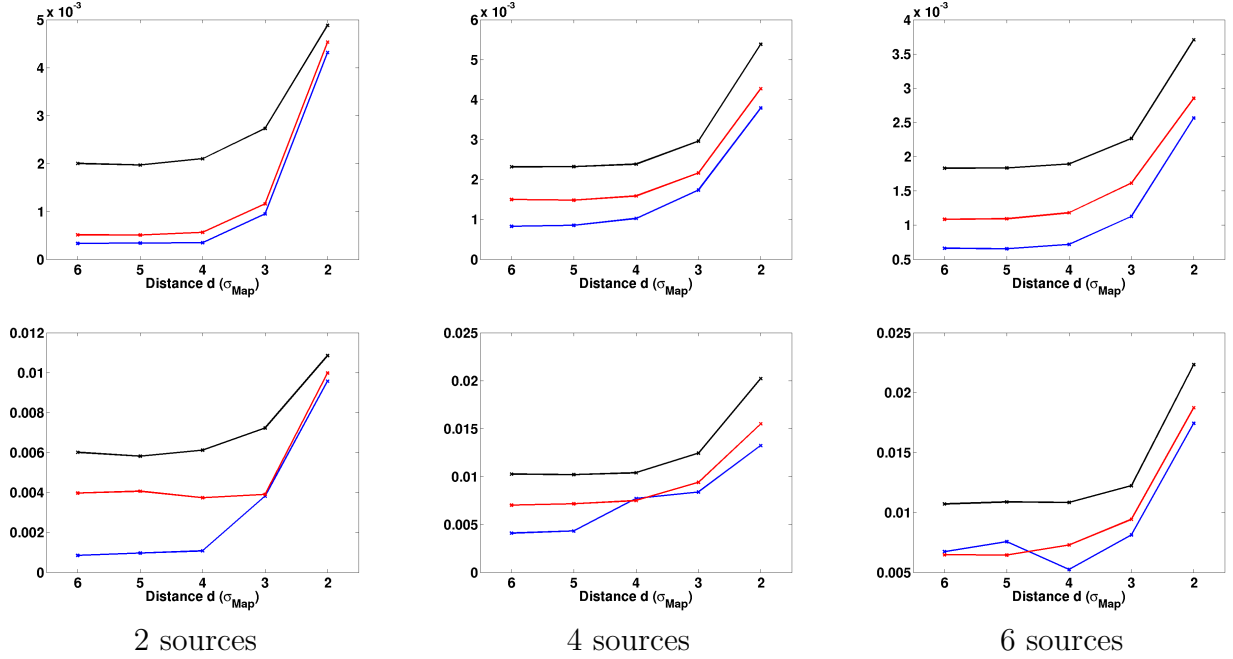


FIGURE 3.12 – Dispersion des solutions de SCA-NMF-Spec obtenues sur les 45 cubes synthétiques avec 100 réalisations de bruit. La ligne du haut illustre le $\text{NMCEB}^{\text{mean}}$ et la ligne du bas le $\text{NMCEB}^{\text{max}}$.

entre 0,05 % et 0,4 % du maximum d'intensité pour des distances comprises entre $d = 6$ et $d = 3$. Dans le pire cas où $d = 2$, elle atteint 0,5 % du maximum d'intensité en moyenne. Le maximum de l'enveloppe de dispersion est également faible dans tous les cas. Il varie entre 0,1 % et 1 % pour des distances comprises entre $d = 6$ et $d = 3$ quel que soit le nombre de sources ou le niveau de bruit considéré. Dans le cas le moins favorable, le maximum atteint 2 % du maximum d'intensité.

Cas pratique De nouveau, on considère le même cas pratique que celui présenté précédemment, pour une réalisation de bruit différente. Les résultats pour les deux positions extrêmes sont montrés sur la Figure 3.13 ainsi que dans le Tableau 3.3.

Dans le cas le plus parcimonieux, on remarque que le spectre estimé a les mêmes caractéristiques que celui obtenu avec la MC-NMF seule. En effet, la raie estimée a une largeur plus faible ce qui entraîne une surestimation du pic d'intensité. En revanche la position du pic d'intensité est correctement estimée et la raie obtenue est symétrique. Sur la carte d'abondance on note la présence résiduelle des deux sources voisines.

Dans le cas le moins parcimonieux, on observe une asymétrie de la raie estimée, la partie droite de la raie étant moins bien estimée que la partie gauche. En effet, on remarque la présence résiduelle d'une contribution spectrale sur la partie droite du spectre estimé. Cette asymétrie entraîne une légère erreur d'estimation de la position du pic d'intensité. On note que le spectre estimé dans ce cas présente les mêmes caractéristiques, plus atténuées, que celui obtenu par SpaceCORR utilisée seule. Sur la carte d'abondance associée, on observe le résidu de la source voisine associée à l'artefact présent sur le spectre.

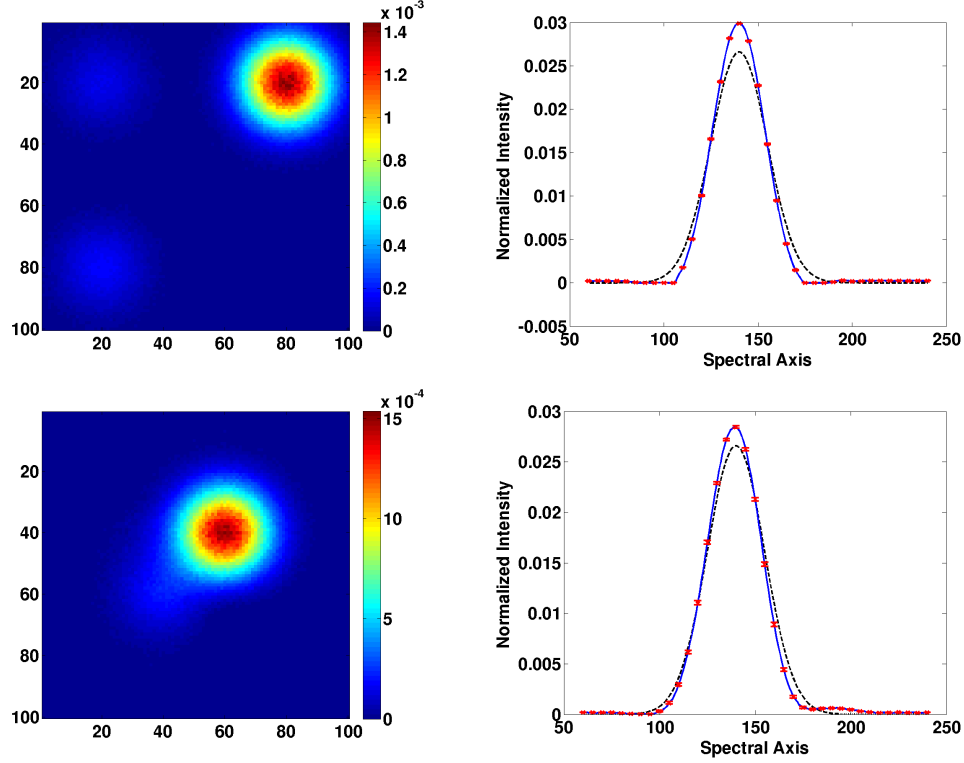


FIGURE 3.13 – Exemple de résultats obtenus par SCA-NMF-Spec dans le cas le plus parcimonieux (ligne du haut) et le moins parcimonieux (ligne du bas). Le spectre estimé est en bleu et le spectre de référence est en tirets noirs. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

Globalement, on note que la source spatiale est correctement positionnée et a une forme régulière. Le résultat visuel est convaincant malgré la présence résiduelle d’artefacts (faibles en intensité) et la sous-estimation de l’intensité d’émission (en lien avec la surestimation du pic d’intensité spectrale). Cependant, l’erreur d’estimation reste conséquente dans les deux cas : 21,4 % pour $d = 6$ et 16,4 % pour $d = 2$.

En ce qui concerne les barres d’erreur, on remarque qu’elles sont quasiment négligeables. Dans le cas le plus favorable, la dispersion des solutions de la NMF est au maximum de 0,57 % du maximum d’intensité pour atteindre 1,46 % dans le pire cas.

	$d = 6\sigma_{Map}$	$d = 2\sigma_{Map}$
$\text{NRMSE}_{\ell=2}$	21,4 %	16,4 %
$\text{SAM}_{\ell=2}$ (rad)	0,102	0,083
$\text{NMCEB}_{\ell=2}^{\text{mean}}$	0,12 %	0,53 %
$\text{NMCEB}_{\ell=2}^{\text{max}}$	0,57 %	1,46 %

TABLE 3.3 – Mesures de performances associées aux résultats obtenus par SCA-NMF-Spec sur le cas pratique ($2^{\text{ième}}$ source du cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB).

Bilan En résumé, cette première version hybride donne des résultats présentant les mêmes caractéristiques que ceux obtenus par la MC-NMF seule, au sens des critères de parcimonie, de nombre de sources et de sensibilité au niveau de bruit. Globalement, les tendances des courbes de la Figure 3.11 sont les mêmes que celles rencontrées dans le cas des cubes contenant 2 sources de la Figure 3.8, avec des erreurs de d'estimation similaires.

En revanche, on note une nette amélioration de la dispersion des solutions données par SCA-NMF-Spec avec une erreur maximale NMCEB^{\max} atteignant 1,46 % dans le cas le plus défavorable (Tableau 3.3). Cette propriété est le principal objectif visé par l'hybridation. Les solutions données par SCA-NMF-Spec sont également très stables vis à vis des 100 réalisations de bruit.

3.3.3.4 SCA-NMF-Map

Les performances globales atteintes par SCA-NMF-Map sont montrées sur la Figure 3.14. De manière générale, on observe que les résultats de SCA-NMF-Map suivent les mêmes tendances que celles observées avec SpaceCORR utilisée seule. La forme des courbes obtenues ici est similaire à celles de la Figure 3.6, seules les valeurs des mesures de performances changent.

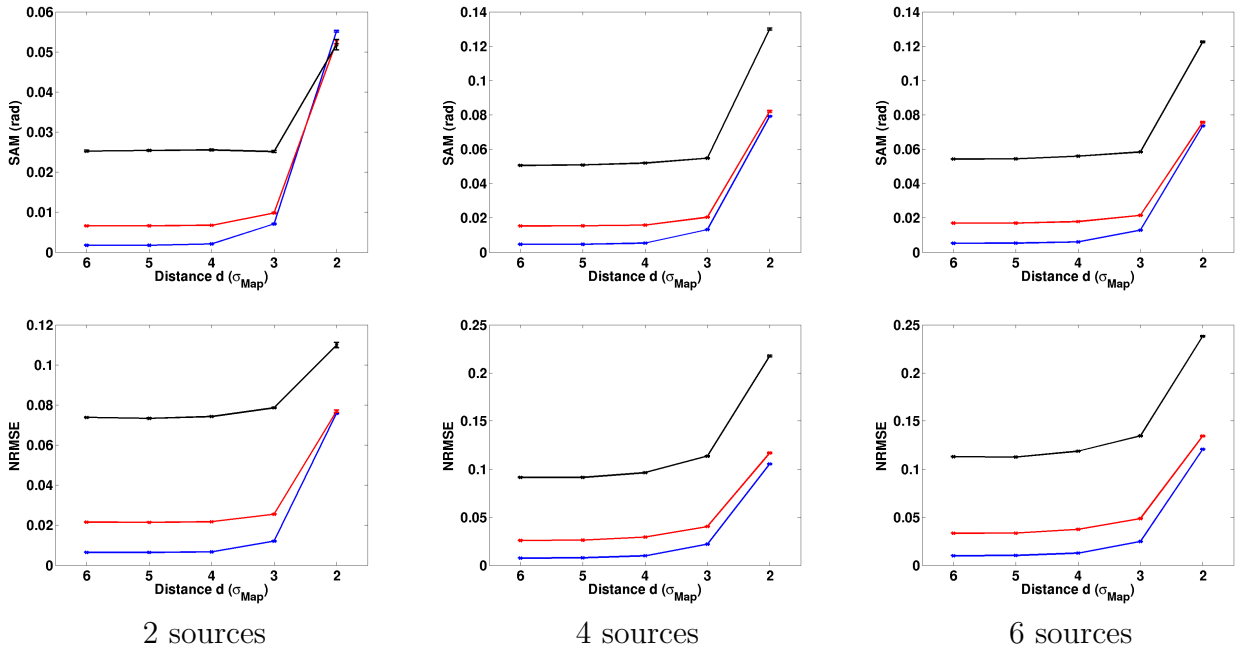


FIGURE 3.14 – Performances atteintes par SCA-NMF-Map sur les 45 cubes synthétiques pour 100 réalisations de bruit avec un SNR de 30 dB (en bleu), 20 dB (en rouge) et 10 dB (en noir). Les barres d'erreur donne l'écart type suivant les 100 réalisations de bruit.

Parcimonie Cette version hybride est sensible au degré de parcimonie présente dans les données. Dans les cas les plus favorables (de $d = 6$ à $d = 3$), les performances sont excellentes

et stables avec une valeur de NRMSE inférieure à 12 % et une valeur de SAM inférieure à 0,06 rad pour un SNR de 10 dB. Lorsque $d = 2$, on atteint de nouveau la limite des conditions d'application de SpaceCORR. On note dans ce cas une nette dégradation des performances, le NRMSE augmentant de 4 à 6 % et le SAM augmentant de 0,03 à 0,05 rad pour un mélange de 2 sources. Cette augmentation atteint 8 % à 13 % pour le NRMSE et 0,06 à 0,08 rad pour le SAM pour les mélanges de 4 et 6 sources. Cependant on constate que les scores atteints sont nettement meilleurs à ceux obtenus par SpaceCORR seule (Figure 3.6).

Nombre de sources Comme pour les résultats de SpaceCORR seule, SCA-NMF-Map est peu sensible au nombre de sources présentes dans les données, dans des conditions idéales de parcimonie (on rappelle que les critères de parcimonie et de nombre de source sont directement liés). On observe que les performances sont identiques, quel que soit le nombre de sources, pour les cubes ayant un SNR de 30 ou 20 dB. De légères variations apparaissent dans les mélanges ayant un SNR de 10 dB avec une augmentation du NRMSE de 2 % et du SAM de 0,03 rad lorsque l'on passe de 2 à 4 sources, puis une augmentation du NRMSE de 2 % et un SAM identique lorsque l'on passe de 4 à 6 sources.

Niveau de bruit On constate que cette version hybride est, comme SpaceCORR, assez robuste aux niveaux de bruit raisonnables (SNR de 20 et 30 dB). Dans ce cas, on observe une légère dégradation des performances lorsque l'on passe d'un SNR de 30 à 20 dB avec une augmentation du NRMSE de 0,5 % à 1 % et du SAM de 0,01 rad sur l'ensemble des cubes correspondants. En revanche, on observe une dégradation plus conséquente avec les cubes ayant un SNR de 10 dB, le NRMSE augmentant de 5 % à 8 % et le SAM de 0,02 à 0,04 rad selon le nombre de sources. On note que cette légère dégradation des performances en fonction du SNR est plus faible que celle observée avec SpaceCORR. De nouveau, on observe que cette méthode hybride est très stable vis à vis des 100 réalisations de bruit. Les barres d'erreur sont négligeables avec dans le pire cas un écart type de 0.13 % pour le NRMSE et 0,013 rad pour le SAM (Figure 3.14).

Barres d'erreur Pour finir, on étudie l'amplitude des barres d'erreur de l'analyse Monte Carlo associée à SCA-NMF-Map détaillée sur la Figure 3.15.

Globalement, on observe les mêmes tendances que la version SCA-NMF-Spec avec cependant une diminution d'un facteur 10 de la dispersion des solutions. En moyenne, la dispersion est inférieure à 0,01 % du maximum d'intensité pour des distances comprises entre $d = 6$ et $d = 3$. Dans le pire cas où $d = 2$, elle reste inférieure à 0,025 % avec une exception, elle atteint 0,05 % pour le mélange contenant 2 sources avec un SNR de 10 dB. Le maximum de la dispersion demeure très faible en restant inférieure à 0,025 % du maximum d'intensité pour un SNR de 20 ou 30 dB et une distance comprise entre $d = 6$ et $d = 3$. Dans le pire cas ($d = 2$ et un SNR de 10 dB), le maximum de dispersion atteint 0,15 %, ce qui reste négligeable.

Cas pratique Les résultats du cas pratique, pour les deux positions extrêmes sont montrés sur la Figure 3.16 ainsi que dans le Tableau 3.4.

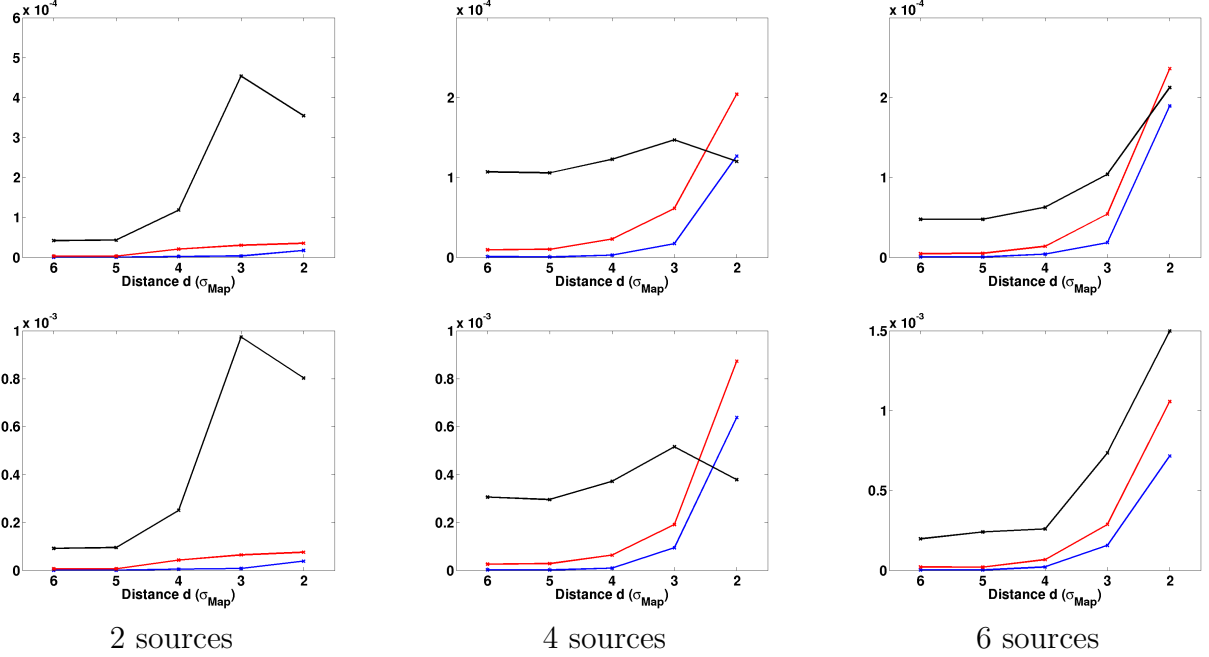


FIGURE 3.15 – Dispersion des solutions de la SCA-NMF-Map obtenues sur les 45 cubes synthétiques avec 100 réalisations de bruit. La ligne du haut illustre le $\text{NMCEB}^{\text{mean}}$ et la ligne du bas le $\text{NMCEB}^{\text{max}}$.

	$d = 6\sigma_{\text{Map}}$	$d = 2\sigma_{\text{Map}}$
$\text{NRMSE}_{\ell=2}$	2,1 %	10,4 %
$\text{SAM}_{\ell=2}$ (rad)	0,016	0,063
$\text{NMCEB}_{\ell=2}^{\text{mean}}$	1,2e-3 %	2,6e-2 %
$\text{NMCEB}_{\ell=2}^{\text{max}}$	3,0e-3 %	8,8e-2 %

TABLE 3.4 – Mesures de performances associées aux résultats obtenus par SCA-NMF-Map sur le cas pratique (2^{ième} source du cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB).

Encore une fois, on remarque que les spectres estimés ont les mêmes caractéristiques que ceux obtenus par SpaceCORR seule. Dans le cas le plus favorable, les résultats sont excellents avec un NRMSE de 2,1 % et un SAM de 0,019 rad, avec une légère sous-estimation du pic d'intensité du spectre se répercutant sur la carte d'abondance.

Dans le cas le moins parcimonieux, on observe la même déformation du spectre estimé que celle décrite pour SpaceCORR. Le spectre est asymétrique et on note la présence résiduelle d'une composante spectrale sur la droite de la raie. Ce résidu entraîne une sous-estimation du pic d'intensité ainsi qu'une erreur d'estimation de la position de ce pic.

Concernant l'estimation de la source spatiale, on remarque qu'elle est correctement positionnée mais on observe également la présence très ténue de la troisième source. Malgré un NRMSE de 10,4 %, le résultat est visuellement acceptable si on tient compte du SNR de 20 dB et du faible nombre de zones mono-sources dans les observations.

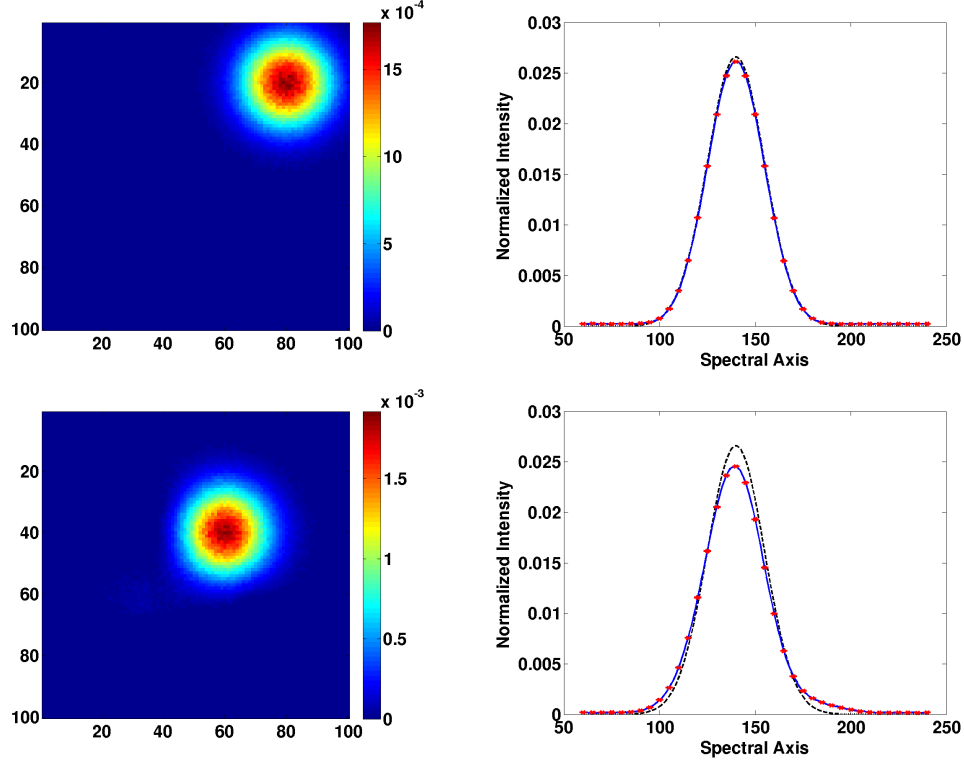


FIGURE 3.16 – Exemple de résultats obtenus par SCA-NMF-Map dans le cas le plus parcimonieux (ligne du haut) et le moins parcimonieux (ligne du bas). Le spectre estimé est en bleu et le spectre de référence est en tirets noirs. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

Les barres d’erreur associées à la dispersion de SCA-NMF-Map sont, comme pour la précédente version hybride, négligeables. Dans le cas le plus parcimonieux, la dispersion maximale est de $3e-3$ % pour atteindre $8,8e-2$ % dans le cas le moins parcimonieux.

Bilan En résumé, cette seconde version hybride donne des résultats présentant les mêmes caractéristiques que ceux obtenus par SpaceCORR, au sens des critères de parcimonie, de nombre de sources et de sensibilité aux niveaux de bruit. Globalement, les tendances des courbes de la Figure 3.14 sont identiques à celles de la Figure 3.6, avec tout de même une nette amélioration des erreurs d’estimation dans les cas les moins favorables. La dispersion des résultats donnés par SCA-NMF-Map devient négligeable, avec un gain d’un ordre de grandeur sur l’amplitude des barres d’erreur par rapport à la précédente version hybride.

Jusqu’ici, nous avons décrit les performances des méthodes individuellement. Dans la section suivante, nous comparons ces différentes approches pour mettre en évidence l’apport des méthodes hybrides.

3.3.4 Comparaisons et discussion des résultats

Afin de rendre aisée la comparaison des différentes méthodes entre elles, nous nous basons sur le cas pratique utilisé précédemment, à savoir le cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB. De nouveau, nous étudions les deux positions extrêmes des sources spatiales $d = 6$ et $d = 2$. Nous récapitulons l'ensemble des résultats obtenus dans le Tableau 3.5. Cependant, contrairement aux paragraphes précédents, les mesures données ne concerne plus uniquement la seconde source, elles sont moyennées suivant les 4 sources. Les conclusions apportées ici cas sont les mêmes quel que soit le nombre de sources ou le niveau de bruit présent dans les données.

		MC-NMF	SpaceCORR	SCA-NMF-Spec	SCA-NMF-Map
$d = 6\sigma_{Map}$	NRMSE	15,34 %	3,04 %	16,60 %	<u>2,58 %</u>
	SAM (rad)	0,074	0,019	0,089	<u>0,015</u>
	NMCEB ^{mean}	2,67 %	-	0,15 %	1,01e-3 %
	NMCEB ^{max}	13,94 %	-	0,83 %	3,0e-3 %
$d = 2\sigma_{Map}$	NRMSE	18,30 %	20,58 %	11,75 %	<u>11,63 %</u>
	SAM (rad)	0,082	0,142	0,06	0,081
	NMCEB ^{mean}	3,68 %	-	0,43 %	1,73e-2 %
	NMCEB ^{max}	23,32 %	-	1,52 %	8,8e-2 %

TABLE 3.5 – Mesures de performances obtenues par les différentes méthodes pour un cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB. Les résultats en gras identifient les cas où les méthodes hybrides améliorent les résultats obtenus par la MC-NMF ou par SpaceCORR utilisées seules. Les résultats soulignés identifient les meilleurs résultats obtenus pour chacun des deux cubes $d = 6$ ou $d = 2$.

3.3.4.1 Apports de SCA-NMF-Spec

Le cas le plus parcimonieux ($d = 6$) donne des résultats assez instables. Dans l'exemple présenté sur le tableau, SCA-NMF-Spec donne des performances en deçà de celles obtenues par les méthodes seules. Cette situation n'est pas systématique, il arrive que SCA-NMF-Spec donne des résultats légèrement meilleurs que la MC-NMF seule, mais systématiquement moins bons que SpaceCORR. Dans ce contexte, SpaceCORR donne des résultats idéaux. Ainsi les spectres utilisés pour initialiser la MC-NMF sont très proches des vrais spectres (avec un écart de 0,019 rad dans l'exemple). Cependant, la MC-NMF initialisée avec ces spectres dégrade systématiquement la qualité des spectres et donc conjointement, la qualité des cartes d'abondance associées. La qualité de l'estimation finale oscille autour de celle obtenue avec la MC-NMF seule. En revanche, on observe dans tous les cas une nette diminution de la dispersion des solutions données par SCA-NMF-Spec par rapport à la dispersion de la MC-NMF. Dans l'exemple présenté ci-dessus, la dispersion maximale est inférieure à 1 % du maximum d'intensité alors qu'elle était au maximum de 14 % pour la MC-NMF seule.

Les résultats obtenus par cette première version hybride sont plutôt mitigés. Le premier objectif des méthodes hybrides est de réduire la dispersion des solutions de la MC-NMF. Cet objectif est correctement rempli dans toutes les configurations testées. Le second objectif

est d'améliorer les résultats de SpaceCORR dans le cas où ceux-ci ne donnent qu'une approximation de la solution. Dans le cas présent de forte parcimonie, la solution donnée par SpaceCORR est excellente, on ne s'attend pas à ce que l'hybridation l'améliore. En revanche, la méthode échoue sur le second objectif puisque la solution idéale de SpaceCORR est largement dégradée par la MC-NMF pour au final donner une solution similaire, en terme d'erreur d'estimation, à celle donnée par la MC-NMF seule.

Dans le cas le moins parcimonieux ($d = 2$), la méthode SCA-NMF-Spec améliore systématiquement les performances obtenues par les méthodes seules. Dans ce contexte, SpaceCORR donne une approximation grossière des composantes spectrales. On a vu dans la Section 3.3.3.1 que le spectre estimé est parasité par la présence résiduelle d'autre(s) composante(s). Cette approximation est ensuite raffinée par la MC-NMF et au final, les performances obtenues sont nettement meilleures que celles obtenues par la MC-NMF ou par SpaceCORR utilisées seules. De nouveau, on observe une nette diminution de la dispersion des solutions données par SCA-NMF-Spec avec des barres d'erreur comparables à celles obtenues dans le cas précédent $d = 6$. La dispersion maximale est d'environ 1,5 % alors qu'elle était au maximum d'environ 23 % pour la MC-NMF seule.

Les résultats obtenus dans ce cas par SCA-NMF-Spec sont tout à fait satisfaisants. Les deux objectifs précédemment mentionnés sont atteints. On observe une amélioration de la qualité de l'estimation par rapport aux méthodes utilisées séparément et SCA-NMF-Spec fournit une solution quasiment unique.

En conclusion, on constate dans tous les cas une réduction conséquente de la dispersion des solutions de SCA-NMF-Spec. L'initialisation avec les spectres estimés avec SpaceCORR rend la NMF très stable, elle fournit des solutions quasiment identiques à chaque tir Monte Carlo. En revanche la qualité de l'estimation de SCA-NMF-Spec dépend fortement du taux de parcimonie présent dans les données. Dans le cas le plus parcimonieux, la solution donnée par SpaceCORR est excellente et ne justifie pas l'emploi d'une méthode hybride (d'autant plus que celle-ci dégrade la solution initiale). Dans le cas où SpaceCORR ne fournit qu'une approximation grossière de la solution, l'hybridation avec la MC-NMF permet une nette amélioration de la qualité de séparation vis à vis des résultats obtenus par les méthodes seules. Ainsi, l'étude des coefficients de qualité des zones d'analyse permet de définir si on se situe dans un cas de forte parcimonie ou non, et donc de choisir la méthode la plus adéquate. Nous reviendrons sur cet aspect dans la conclusion des tests synthétiques (Section 3.3.4.3).

3.3.4.2 Apports de SCA-NMF-Map

Globalement, on constate que les performances de cette version hybride sont toujours meilleures que celles obtenues avec les méthodes MC-NMF ou SpaceCORR utilisées séparément (contrairement à la version SCA-NMF-Spec).

Ainsi, dans le cas le plus parcimonieux ($d = 6$), la solution donnée par SpaceCORR est améliorée bien que celle-ci soit déjà excellente, en considérant les niveaux de bruit conséquents présents dans les données. La dispersion des solutions de SCA-NMF-Map est négligeable (au maximum elle atteint 3,0e-3 % du maximum d'intensité dans l'exemple ci-dessus).

Dans le cas le moins parcimonieux ($d = 2$), on obtient des performances d'estimation

(SAM et NRMSE) similaires à celles obtenues par SCA-NMF-Spec. L'approximation des sources spatiales issues de SpaceCORR est nettement améliorée. De nouveau, la dispersion des solutions données par SCA-NMF-Map est négligeable avec un maximum de $8,8 \times 10^{-2} \%$ dans l'exemple considéré.

On notera cependant que bien que la qualité de d'estimation soit similaire entre les méthodes hybrides, on observe deux tendances. Globalement, les spectres sont mieux estimés par la méthode SCA-NMF-Spec (comme dans l'exemple précédent). La meilleure qualité de d'estimation des cartes d'abondance est généralement obtenue par SCA-NMF-Map. On souligne cependant qu'il n'y a pas de différence fondamentale entre les deux méthodes. Le second point à mentionner est que, bien que les valeurs des mesures de performances soient similaires entre les deux version hybrides, les erreurs mesurées sont différentes. Dans le cas de SCA-NMF-Spec, le pic d'intensité est systématiquement surestimé (l'intensité de la source est donc sous estimée). Dans le cas de SCA-NMF-Map, on observe le phénomène inverse, *i.e.* le pic d'intensité spectral est surestimé et l'intensité de la source est sous estimée.

En conclusion, on constate que SCA-NMF-Map permet de réduire considérablement la dispersion des solutions données par la MC-NMF, les résultats obtenus sont quasiment uniques. La qualité de l'estimation est systématiquement meilleure que celle obtenue par les méthodes utilisées séparément (même dans le cas où SpaceCORR est utilisée dans des conditions idéales). Cependant, la qualité de l'estimation obtenue dans le cas le moins parcimonieux est généralement un peu en deçà de celle obtenue par SCA-NMF-Spec.

3.3.4.3 Conclusion des tests synthétiques

Les deux méthodes hybrides présentées dans ce chapitre améliorent, d'une part, nettement la dispersion des solutions données par la MC-NMF utilisée seule. Ce point constitue le premier intérêt d'utiliser les méthodes hybrides. Le second point est la qualité de décomposition atteinte par les méthodes hybrides. Les tests sur données synthétiques montrent que, selon le taux de parcimonie conjointe des sources, il est préférable d'utiliser l'une ou l'autre des deux versions hybrides. Si l'hypothèse de parcimonie est réaliste dans les données, *i.e.* si les résultats donnés par la méthode SpaceCORR utilisée seule sont bons et ne constituent pas une approximation, la méthode SCA-NMF-Map est à privilégier. En effet, dans ce cas une forte contrainte sur l'initialisation de la NMF, *i.e.* au sens du nombre de paramètres fixés, permet d'affiner les estimations de SpaceCORR, alors que dans les mêmes conditions la méthode SCA-NMF-Spec dégrade les résultats de SpaceCORR. On rappelle que le nombre d'échantillons dans les cartes d'abondance est nettement supérieur au nombre d'échantillons dans les spectres élémentaires.

A contrario, si les résultats donnés par SpaceCORR sont approximatifs, la méthode SCA-NMF-Spec donne généralement les meilleurs résultats. Dans ce cas, il est préférable de laisser davantage de liberté à la NMF pour améliorer l'estimation donnée par SpaceCORR.

Le choix de la méthode hybride dépend donc de la qualité mono-source des zones d'analyse. Cependant, un coefficient de qualité proche de 1 est une condition nécessaire mais non suffisante. En effet, si plusieurs zones d'analyse ont un coefficient de qualité proche de 1, rien ne garantit qu'il y ait une zone d'analyse correspondant à chaque source présentes dans le mélange. Il est donc nécessaire de compléter l'étude des cartes de coefficients de qualité (telle

que celle montrée sur la Figure 3.18) par une étude des résultats de la séparation des données effectuée avec une autre méthode de SAS (la MC-NMF par exemple). Ainsi la comparaison de la carte des coefficients de qualité avec les cartes d’abondance estimées permet de valider l’hypothèse de présence de zones mono-sources pour chaque source et donc de choisir la méthode hybride adéquate.

Pour l’application sur des données réelles, l’hypothèse de présence de zones parfaitement mono-sources pour chaque source est généralement peu réaliste, *i.e* les données réelles sont proches du cas $d = 2$ des données simulées. Ainsi dans ce cas, le choix de la méthode hybride passe par l’analyse du coefficient de qualité des zones mono-sources obtenu avec SpaceCORR ainsi que par l’estimation visuelle par les expert de la qualité de la décomposition obtenue par SpaceCORR. Nous illustrerons ce commentaire dans la section suivante portant sur l’application des méthodes hybrides sur données réelles.

3.4 Résultats expérimentaux sur données réelles

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus par les différentes approches précédemment présentées sur le cube hyperspectral de la Tête de Cheval cartographiée par HIFI-Herschel (Figure 2.10 (a)). Nous précisons que l’utilisation de SpaceCORR sur ces données est parfaitement justifiée, l’hypothèse de parcimonie étant réaliste (présence de deux sources spatiales vérifiant l’*Hypothèse 7*, page 70). Cette hypothèse est déduite des résultats obtenus par la NMF employée seule (voir les travaux [14], ainsi que la Figure 3.21).

Avant de présenter les résultats, on mentionne que les données de la Tête de Cheval contiennent deux sources spatiales. Ce nombre est estimé par la méthode présentée dans la Section 1.3.1. La courbe des valeurs propres de la matrice de covariance spatiale des données est montrée sur la Figure 3.17. L’estimation du nombre de sources est dans ce cas sans ambiguïté, on observe une nette cassure dans la courbe à l’indice 3.

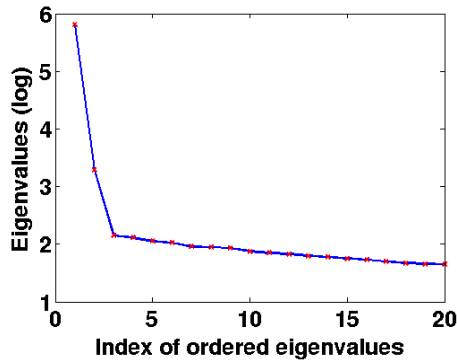


FIGURE 3.17 – Courbes des 20 premières valeurs propres de la matrice de covariance spatiale des données de la Tête de Cheval.

Sur l’ensemble des figures montrant les résultats obtenus sur la Tête de Cheval, la ligne

en pointillés indique la vitesse systémique de la nébuleuse (10.7 km/s). Arbitrairement, on choisit d'appeler la composante montrée sur la première ligne des figures la première source (S1) et la composante montrée sur la ligne du bas la seconde source (S2).

3.4.1 SpaceCORR

Nous présentons ici les résultats de la décompositions donnée par SpaceCORR. Avant de les commenter, nous étudions la carte des coefficients de qualité q_Z des zones d'analyse (Figure 3.18).

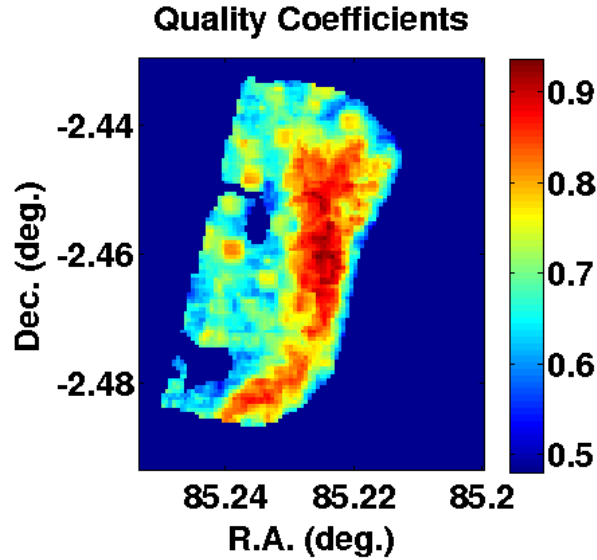


FIGURE 3.18 – Carte des coefficients de qualité q_Z des zones d'analyse obtenue pour la Tête de Cheval. Les zones d'analyse Z ont une dimension de 5×5 pixels et le recouvrement est de 80 % suivant chacune des directions Ox et Oy .

L'étude de la qualité mono-source des zones d'analyse a deux objectifs. Le premier est de vérifier l'accessibilité de chaque source en comparant la carte des coefficients de qualité q_Z avec les résultats donnés par la MC-NMF (Section 3.4.2). La carte permet également de fixer le seuil permettant de discriminer les zones dites mono-sources, ou quasiment mono-sources, des autres.

Dans le cas présent on constate que les coefficients atteignent au maximum une valeur de 0,937, *i.e.* les meilleures zones d'analyse ne sont pas totalement mono-sources. Cependant au regard de la répartition des zones d'analyse potentiellement mono-sources (identifiées en comparant la Figure 3.18 avec les carte de la Figure 3.21), on observe que la première source est largement représentée. Le cas de la seconde source est moins évident avec seulement quelques zones d'analyse ayant un coefficient $q_Z > 0,85$, ce qui rend l'extraction de cette source plus délicat. On note d'ailleurs que le seuil utilisé pour discriminer les zones d'analyse est de 0,8.

Le second objectif est, comme nous l'avons vu lors des tests synthétiques, de choisir quelle version hybride utiliser. Dans ce cas, on remarque qu'une source n'est accessible qu'au prix

d'un seuil sur la qualité des zones d'analyse relativement bas, ce qui laisse présager que l'extraction des sources n'est pas parfaite, au sens où des résidus de l'autre composante peuvent subsister dans les spectres estimés. Ainsi le choix se porterait plutôt vers la méthode Hybride-Spec.

La Figure 3.19 montre les résultats obtenus par SpaceCORR. On remarque deux différences principales par rapport aux résultats obtenus par la MC-NMF. Le premier est que les frontières entre les deux sources spatiales sont plus franches. Les sources obtenues sont quasiment disjointes.

Les spectres estimés conservent un profil pseudo gaussien mais on constate qu'ils sont plus déformés que ceux obtenus par la MC-NMF, ils sont encore moins symétriques ce qui laisse penser qu'il reste une contribution résiduelle dans chaque spectre élémentaire. On notera également que le pic d'intensité est moins décalé sur l'axe des vitesses, ce qui renforce l'idée de présence de résidus. On souligne tout de même que les résultats obtenus sont cohérents et corrects au regard du niveau de bruit (estimé à 30 dB) présent dans les données. Cette première estimation constitue une bonne base pour nos méthodes hybrides.

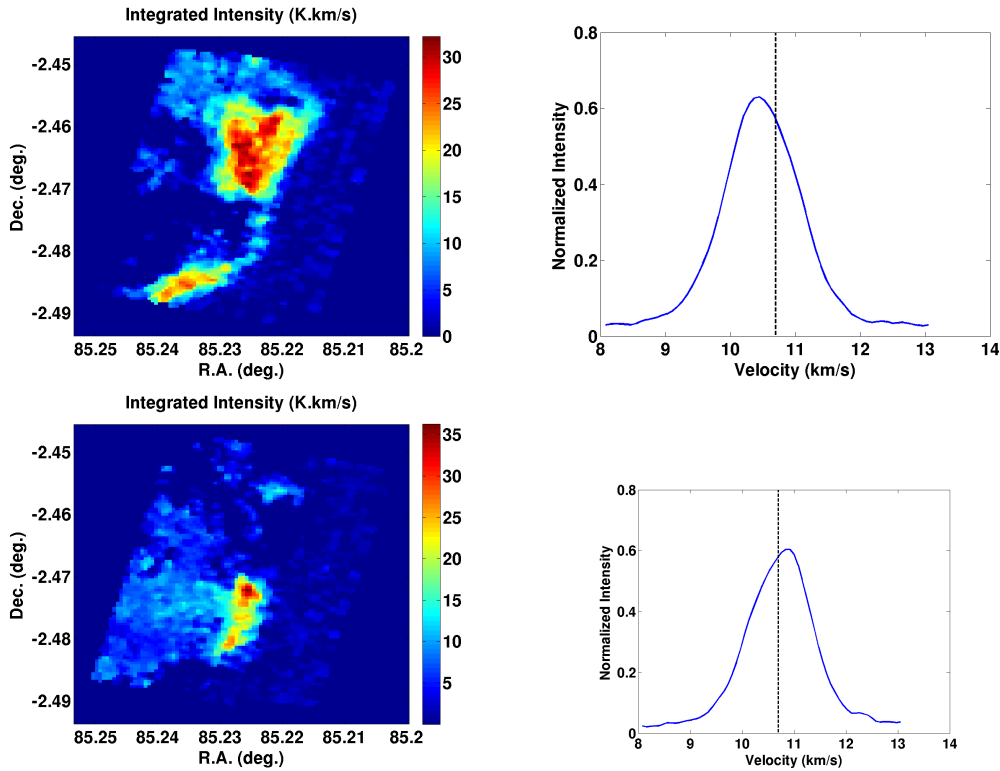


FIGURE 3.19 – Cartes d'abondance et spectres obtenus par l'application de SpaceCORR aux données de la Tête de Cheval.

3.4.2 MC-NMF

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus par la MC-NMF seule. Lors de la description de cette méthode (Section 3.2.2), nous avons mentionné l'ajout d'une étape de normalisation des spectres à chaque itération de l'algorithme de la NMF : Eq. (3.10). Le but de cette normalisation est de réduire la dispersion des solutions de la NMF en contraignant les coefficients d'échelle entre les sources spatiales et les spectres élémentaires associés. L'efficacité de cette étape n'a pas été vérifiée lors des tests sur données synthétiques, seule la version avec l'étape de normalisation ayant été employée. Nous illustrons ici le gain qu'elle apporte sur la qualité de la décomposition des données réelles. La Figure 3.20 montre les résultats obtenus sans l'étape de normalisation et la Figure 3.21 donne les résultats de la MC-NMF normalisés suivant l'équation (3.10). On notera que ces derniers résultats sont ceux disponibles dans l'étude [14].

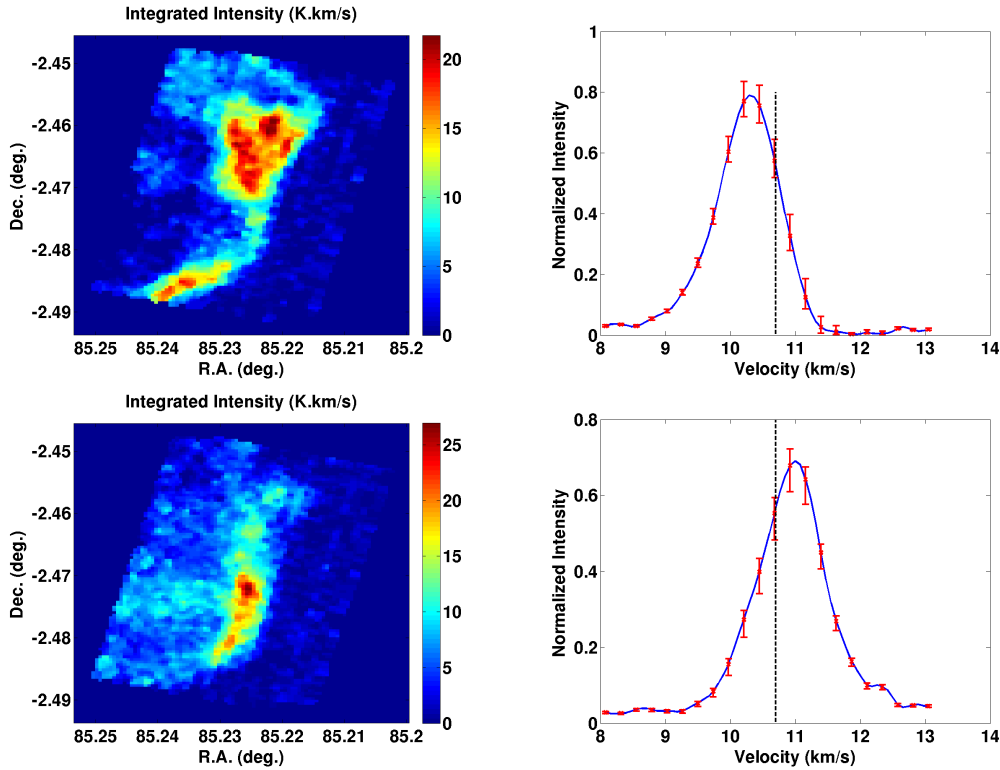


FIGURE 3.20 – Cartes d'abondance et spectres obtenus par l'application de la MC-NMF sans l'étape de normalisation aux données de la Tête de Cheval. Les barres d'erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

On constate que l'étape de normalisation provoque une nette diminution de la dispersion des solutions de la NMF. Les barres d'erreur ne sont pas négligeables mais cette étape constitue déjà une amélioration de l'algorithme de base de la NMF. On souligne qu'il n'y a pas de différence notable entre les cartes d'abondance et les spectres élémentaires estimés avec la version normalisée ou non de la MC-NMF.

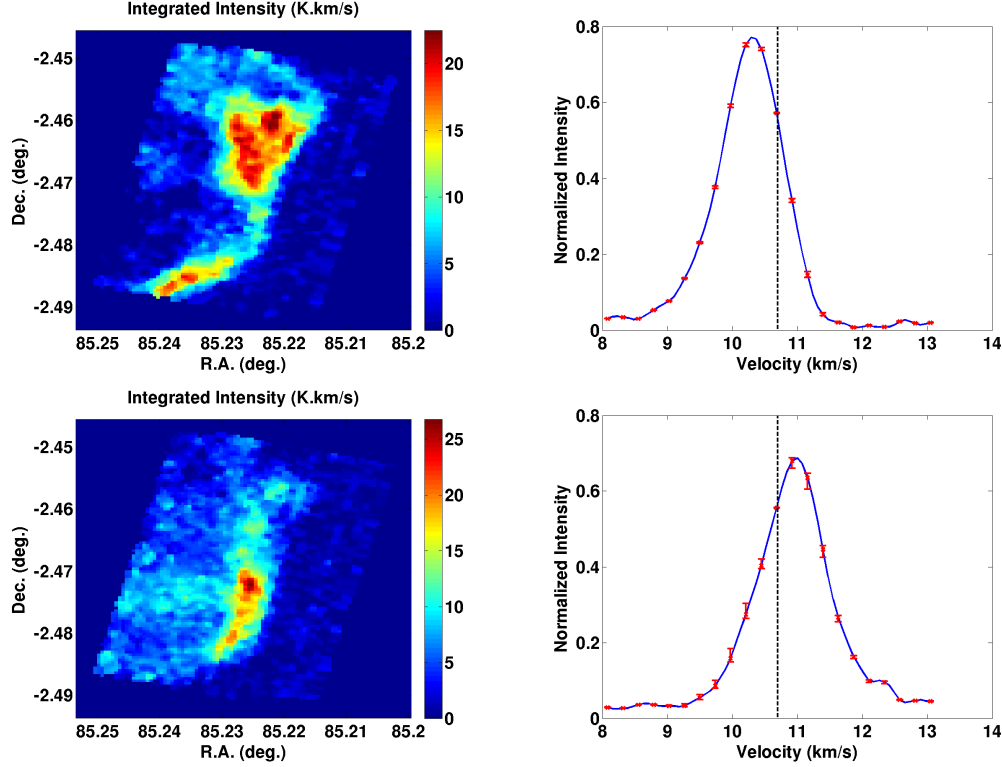


FIGURE 3.21 – Cartes d’abondance et spectres obtenus par l’application de la MC-NMF avec l’étape de normalisation aux données de la Tête de Cheval. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

Concernant la qualité de la séparation, on note que les deux raies d’émissions estimées ne sont pas perturbées par la présence résiduelle de l’autre composante spectrale. Les spectres estimés ont un profil pseudo gaussien et leurs pics d’intensité sont décalés de part et d’autre de la vitesse systémique, constituant ainsi une composante “blue-shift” à 10,3 km/s et une composantes “red-shift” à 11,0 km/s.

Une interprétation de ces résultats est que le nuage de gaz s’évapore sous l’action du rayonnement UV provenant de l’étoile massive proche. A cause de la géométrie de la surface du nuage de gaz et de l’évaporation normale à cette surface, une partie du gaz s’évapore vers l’observateur, créant la composante “blue-shift”, l’autre s’évaporant dans la direction opposée, créant ainsi la composante “red-shift”.

Par ailleurs, on observe que les deux sources spatiales correspondent à deux régions distinctes de la nébuleuse. Ainsi l’hypothèse de parcimonie conjointe des sources semble valide pour ces données, ce qui permet l’utilisation de la méthode SpaceCORR.

3.4.3 Méthodes hybrides

La Figure 3.22 montre les résultats obtenus avec SCA-NMF-Spec et la Figure 3.23 montre ceux obtenus par SCA-NMF-Map.

Globalement, les méthodes donnent les mêmes tendances que celles observées lors des

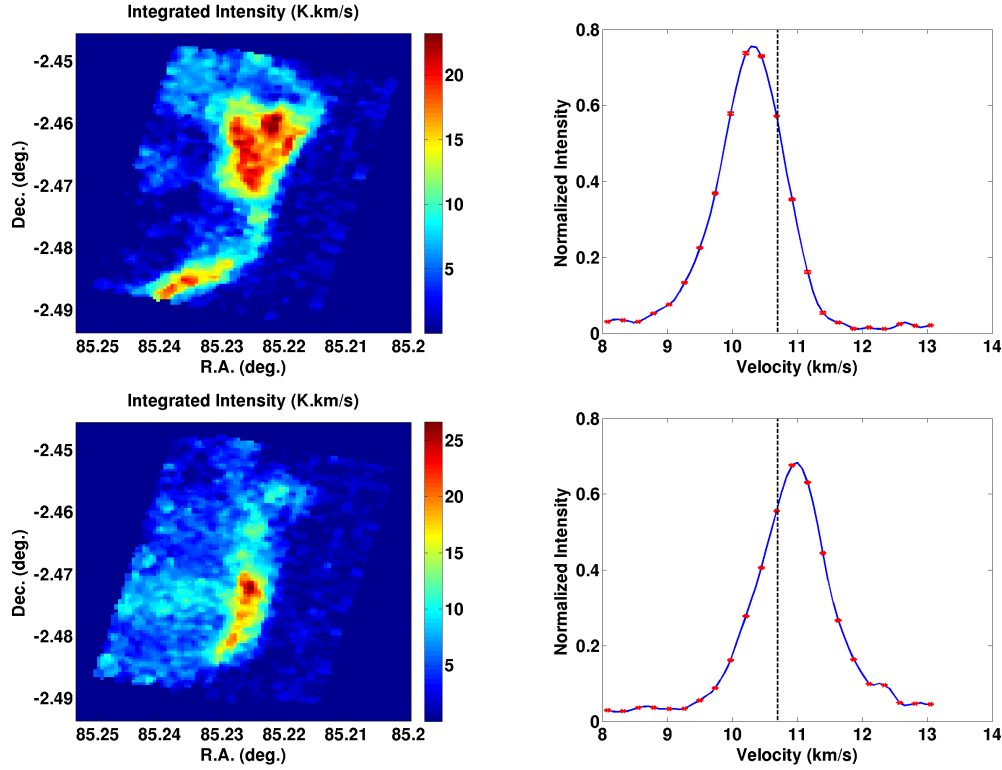


FIGURE 3.22 – Cartes d’abondance et spectres obtenus par l’application de SCA-NMF-Spec aux données de la Tête de Cheval. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

tests sur données synthétiques. Les résultats obtenus par la méthode SCA-NMF-Spec sont visuellement proches de ceux obtenus par la MC-NMF. Ceux de SCA-NMF-Map sont proches des résultats obtenus par SpaceCORR. On note que la version SCA-NMF-Map a gommé les approximations de SpaceCORR en donnant des spectres moins déformés avec un pic d’intensité plus décalé, les cartes d’abondance quant à elles sont plus lisses.

Concernant les barres d’erreur, elles sont devenues quasiment négligeables, ainsi l’initialisation avec les estimations de SpaceCORR a rendu le résultat de la MC-NMF quasi unique. Dans le paragraphe suivant nous concluons sur les résultats des méthodes hybrides dans ce cas réel.

3.4.4 Bilan de l’étude du cas réel

Afin de conclure sur l’application des méthodes hybrides sur les données HIFI-Herschel de la Tête de Cheval, nous représentons l’ensemble des composantes spectrales estimées sur la Figure 3.24.

Le premier constat est la proximité des estimations des méthodes hybrides avec les méthodes seules. En effet, on remarque de nouveau que la composante spectrale issue de la méthode SCA-NMF-Spec est proche de celle obtenue par MC-NMF et a contrario, celle de SCA-NMF-Map est proche de celle obtenue par SpaceCORR. On remarque également

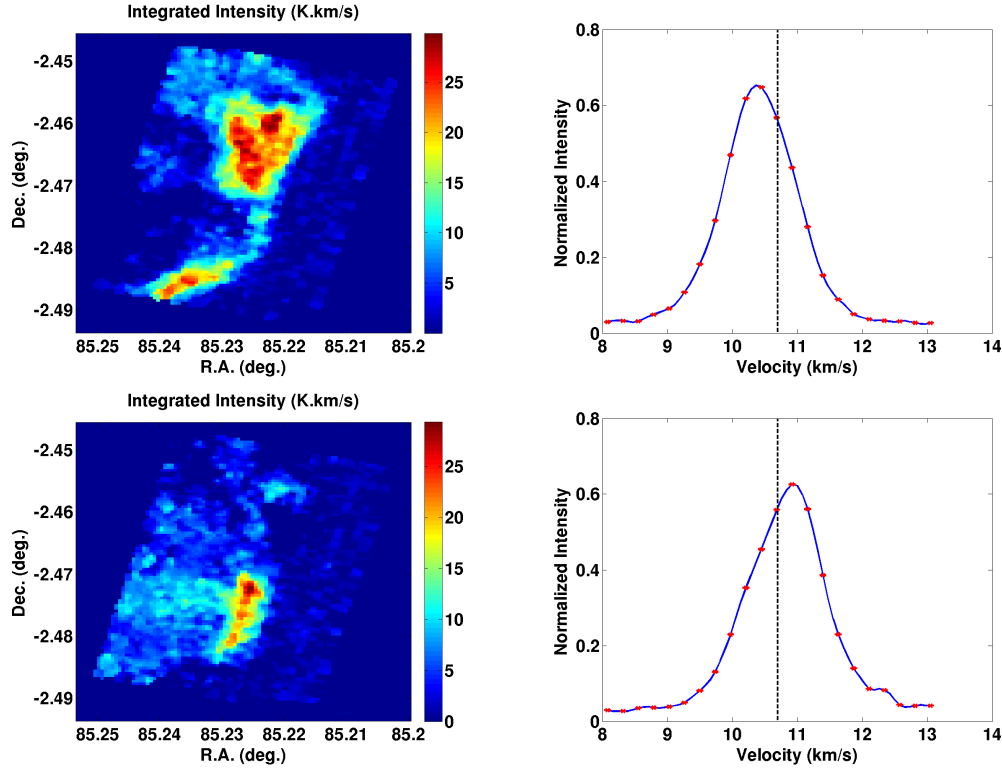


FIGURE 3.23 – Cartes d’abondance et spectres obtenus par l’application de SCA-NMF-Map aux données de la Tête de Cheval. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

que les spectres estimés par les méthodes hybrides constituent des “versions intermédiaires” des spectres obtenus par les méthodes seules. La position du pic d’intensité des méthodes hybrides est située entre les deux positions obtenues par la NMF et par SpaceCORR.

On rappelle que lors des tests synthétiques, la MC-NMF avait tendance à surestimer le pic d’intensité, au prix d’une diminution de la largeur de la raie, et a contrario, SpaceCORR avait tendance à sous estimer le pic accompagnée d’un élargissement de la raie. On retrouve bien ces tendances sur la Figure 3.24. Ainsi lors des tests synthétiques, la NMF et SpaceCORR donnaient un encadrement de la vraie solution, encadrement affiné par les méthodes hybrides. Cette tendance se retrouve sur les données réelles, ainsi on peut supposer que la vraie solution est comprise entre les estimations des deux méthodes hybrides.

On reporte les mesures de dispersions des méthodes dans le Tableau 3.6. On observe que les méthodes hybrides donnent une dispersion toujours inférieure à 1 % du maximum d’intensité ce qui rend la solution de la MC-NMF quasiment unique. Cependant, on notera que même si la diminution des barres d’erreur des méthodes hybrides est systématique elle ne sont pas toujours négligeables.

	MC-NMF-v0		MC-NMF		SCA-NMF-Spec		SCA-NMF-Map	
	S1	S2	S1	S2	S1	S2	S1	S2
NMCEB ^{mean}	5,58 %	5,29 %	0,6 %	1,8 %	0,34 %	0,07 %	0,02 %	0,05 %
NMCEB ^{max}	15,97 %	16,32 %	2,16 %	5,52 %	0,93 %	0,19 %	0,08 %	0,14 %

TABLE 3.6 – Récapitulatif des mesures de dispersion des solutions de la MC-NMF pour les différentes méthodes. La méthode nommée MC-NMF-v0 est la version de la MC-NMF sans l'étape de normalisation à chaque itération de la NMF.

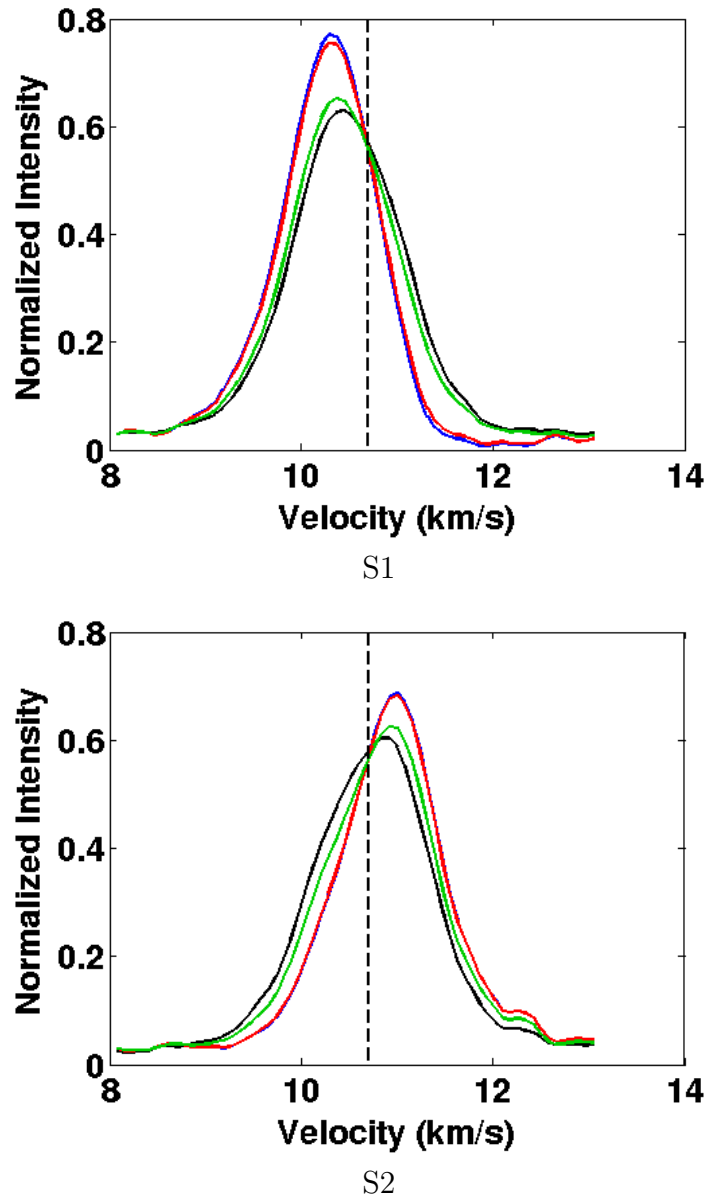


FIGURE 3.24 – Représentation de l'ensemble des versions des deux raies d'émissions de la Tête de Cheval. Les spectres bleus sont obtenus par la MC-NMF, les noirs par SpaceCORR, les rouges par SCA-NMF-Spec et les verts par SCA-NMF-Map.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté nos premières contributions pour résoudre le problème de SAS dans un contexte astrophysique. La méthode proposée est une hybridation des méthodes SpaceCORR et MC-NMF, l'idée étant de tirer parti des avantages respectifs des deux méthodes seules.

Nous avons ensuite effectué un ensemble de tests sur données synthétiques réalistes permettant d'évaluer les performances de cette approche et de définir les conditions d'application des deux versions hybrides proposées. Pour finir nous avons validé ces expérimentations en appliquant nos méthodes sur données réelles et en comparant nos résultats à ceux obtenus avec les méthodes utilisées seules. La pertinence des résultats nous permet de valider cette approche.

Cependant, les méthodes hybrides restent dans une moindre mesure sensible au taux de parcimonie conjointe spatiale présente dans les données. Dans le chapitre suivant nous proposons une première approche permettant de relâcher cette hypothèse de parcimonie nécessaire à SpaceCORR.

Chapitre 4

Méthode géométrique à pixels purs et somme d'abondance non contrainte

Sommaire

Introduction	113
4.1 Propriétés géométriques	114
4.1.1 Cône simplicial	114
4.1.2 Critère de séparation	116
4.1.2.1 Cas de deux vecteurs observés	116
4.1.2.2 Cas d'un vecteur observé et de sa projection	117
4.2 La méthode MASS	118
4.2.1 Estimation de la matrice de mélange	118
4.2.1.1 Les deux premières colonnes de A	118
4.2.1.2 Toutes les autres	119
4.2.1.3 Prise en compte du bruit	119
4.2.2 Reconstruction des sources	120
4.3 Méthodes hybrides	120
4.4 Résultats expérimentaux sur données synthétiques	121
4.4.1 MASS	122
4.4.2 MASS-NMF-Spec	125
4.4.3 MASS-NMF-Map	129
4.4.4 Comparaisons et discussion des résultats	132
4.4.4.1 Apports de MASS-NMF-Spec	133
4.4.4.2 Apports de MASS-NMF-Map	134
4.4.4.3 Comparaison MASS / SpaceCORR	135
4.4.4.4 Conclusion des tests synthétiques	135
4.5 Résultats expérimentaux sur données réelles	136
4.5.1 MC-NMF	137
4.5.2 MASS	138
4.5.3 Méthodes hybrides	140
4.5.4 Bilan pour les données réelles	141

Conclusion	144
----------------------	-----

Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons proposé une approche de SAS basée sur la méthode SpaceCORR. L’efficacité de SpaceCORR repose essentiellement sur la présence de zones mono-sources pour chaque source, la dimension des zones d’analyse étant un paramètre directement lié à cette propriété. L’approche hybride que nous avons alors proposée avait pour objectif de raffiner les résultats de SpaceCORR par un algorithme de MC-NMF pour compenser le cas où SpaceCORR ne fournit qu’une estimation grossière d’une ou plusieurs composantes du mélange. Suite à de nombreux tests sur données synthétiques et réelles, nous avons conclu que malgré une nette amélioration des performances des méthodes SpaceCORR et MC-NMF utilisées seules, les méthodes hybrides restaient dans une moindre mesure sensibles à la qualité des zones d’analyse dites mono-sources.

Une conséquence directe de ces conclusions est l’impossibilité d’utiliser la méthode SpaceCORR (et donc les méthodes hybrides associées) sur les données de HIFI-Herschel de la nébuleuse NGC7023-NW (voir la Section 2.6). En effet, le faible nombre d’échantillons spatiaux (32×39 pixels) et la présence de 6 sources rendent l’hypothèse d’accessibilité des sources (*Hypothèse 7* - page 70) irréalisable.

Dans ce chapitre, nous présentons une approche possible afin de rendre plus souple l’hypothèse d’accessibilité des sources. L’idée développée ici est de réduire la dimension des zones d’analyse à un seul échantillon spatial (*i.e.* à un seul pixel observé) en utilisant un autre principe de séparation. La méthode que nous proposons, appelée MASS (pour *Maximum Angle Source Separation* en anglais) est basée sur l’hypothèse qu’il existe pour chaque source au moins un pixel observé où seule cette source est active. Si les données observées non négatives vérifient cette hypothèse, l’ensemble des observations forme alors une structure géométrique particulière : un cône simplicial inclus dans l’orthant positif, qu’il est possible d’exploiter pour réaliser le démélange des données. La méthode MASS proposée ici entre dans la catégorie des méthodes géométriques détaillée dans la Section 1.4.5 portant sur l’état de l’art des méthodes de SAS.

De nouveau, nous insistons sur l’absence de somme à 1 des coefficients de mélange dans notre contexte (voir Section 2.2.2 pour plus de détails sur le modèle de données en astrophysique).

On mentionne que les méthodes géométriques sont particulièrement étudiées en observation de la Terre, dû à la représentation des observations sous forme de simplexe induit par la somme à 1 des coefficients d’abondance (voir Section 2.4.2). Pour résumer, dans notre cas les observations sont contenues dans un cône simplicial et non un simplexe, notre méthode a donc pour objectif l’identification de ce cône simplicial. Dans la suite du chapitre, nous omettrons le terme “simplicial” pour alléger le discours.

Dans les sections suivantes, nous décrirons tout d’abord les propriétés géométriques des données sous l’hypothèse de présence de pixels non mélangés dans les données, puis nous justifierons la séparabilité des données par cette approche. Ensuite, nous détaillerons l’algorithme de MASS puis nous discuterons de son hybridation possible avec la MC-NMF. Pour finir nous évaluerons les performances de MASS sur les données synthétiques utilisées pour évaluer SpaceCORR (voir Section 3.3.1) et nous appliquerons cette approche aux données

réelles.

4.1 Propriétés géométriques

4.1.1 Cône simplicial

En premier lieu, nous modifions les notations du modèle de mélange linéaire Eq. (2.15) afin d'adopter plus aisément une approche géométrique (on reste tout de même dans une approche spatiale des sources). Chaque spectre observé est représenté comme un élément d'un \mathbb{R}^N espace vectoriel. Le modèle de mélange en considérant des sources spatiales s'écrit :

$$x_m(n) = \sum_{\ell=1}^L a_{\ell}(n) s_{\ell m} \quad \forall n \in \{1, \dots, N\}, \quad (4.1)$$

où x_m est la $m^{\text{ième}}$ colonne de X (*i.e.* le $m^{\text{ième}}$ spectre observé), a_{ℓ} la $\ell^{\text{ième}}$ colonne de A (*i.e.* le $\ell^{\text{ième}}$ spectre élémentaire) et $s_{\ell m}$ et le coefficient d'abondance associé. Pour la partie théorique de ce chapitre, nous emploierons plutôt le vocabulaire de la géométrie, *i.e.* nous appellerons vecteurs les différents spectres (observés ou élémentaires). Ainsi chaque vecteur observé x_m est issu de la combinaison linéaire des éléments de A :

$$x_m = A s_m \quad A \in \mathbb{R}_+^{N \times L}, \quad s_m \in \mathbb{R}_+^L, \quad m \in \{1, \dots, M\}, \quad (4.2)$$

où le vecteur s_m est la $m^{\text{ième}}$ colonne de S . Chaque vecteur observé est la combinaison linéaire non négative des colonnes de A , elles-mêmes non négatives. En supposant que A est de rang de colonne plein, l'ensemble de toutes les combinaisons linéaires non négatives des colonnes de A :

$$\mathcal{C}(A) = \{c \mid c = Av, v \in \mathbb{R}_+^L\}, \quad (4.3)$$

forme un cône simplicial dans \mathbb{R}_+^N (l'orthant positif de \mathbb{R}^N). Les vecteurs colinéaires aux colonnes a_{ℓ} de A , sont les ℓ arêtes \mathcal{E}_{ℓ} du cône $\mathcal{C}(A)$:

$$\mathcal{E}_{\ell} = \{c \mid c = \alpha a_{\ell}, \alpha \in \mathbb{R}_+\}. \quad (4.4)$$

Ces définitions ont déjà été évoquées dans l'état de l'art de la SAS portant sur les méthodes géométriques (Section 1.4.5), en inversant les rôles (et donc les dimensions) des deux matrices A et S .

Par définition, l'ensemble des vecteurs observés x_m donnés par l'Eq. (4.2) est contenu dans le cône $\mathcal{C}(A)$ engendré par les colonnes de A défini par l'Eq. (4.3).

Nous formulons alors l'hypothèse suivante : soit \tilde{x}_m un vecteur observé n'ayant que la source d'indice $\ell_0 \in \{1, \dots, L\}$ active (*i.e.* toutes les sources d'indices $\ell \neq \ell_0$ sont nulles). L'expression d'une telle observation mono-source s'écrit alors :

$$\tilde{x}_m = a_{\ell_0} s_{\ell_0 m}, \quad (4.5)$$

L'observation \tilde{x}_m est donc colinéaire à la $\ell_0^{\text{ième}}$ colonne de A . On reconnaît alors l'expression d'une arête (Eq. (4.4)) du cône engendré par A .

Ainsi, si chaque source est présente dans au moins un vecteur mono-source, on peut identifier chaque colonne de A (à un coefficient d'échelle près) en identifiant les arêtes du cône englobant l'ensemble des données.

Hypothèse 8 : Pour chaque source, il existe au moins un vecteur observé x_m (*i.e.* une colonne de X) pour lequel une unique source est active (*i.e.* la $m^{\text{ième}}$ colonne de S a une unique valeur non nulle).

Si cette hypothèse est vérifiée par les données, le cône engendré par les vecteurs observés $\mathcal{C}(X)$ est confondu avec le cône $\mathcal{C}(A)$. Ainsi, identifier l'enveloppe convexe englobant les observations X permet d'identifier les colonnes de la matrice de mélange A . Cette situation est schématisée sur la Figure 4.1.

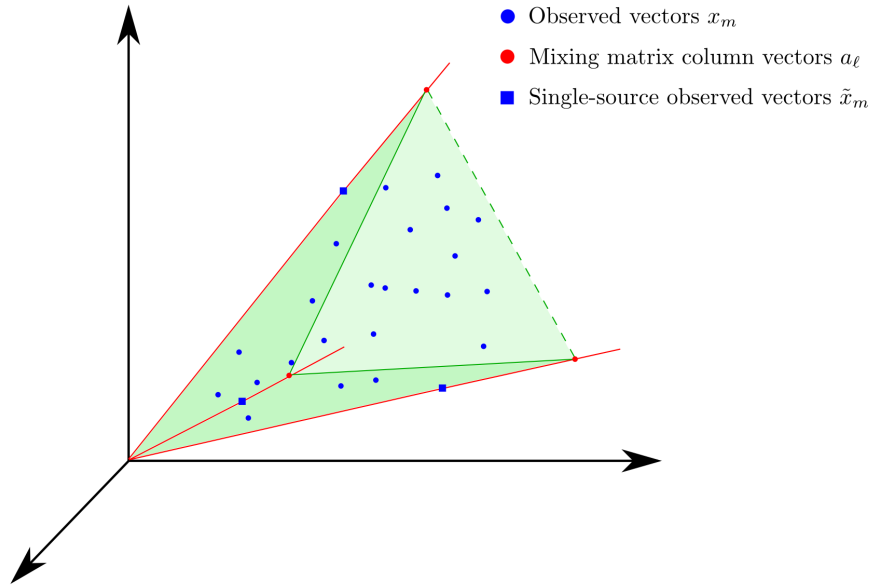


FIGURE 4.1 – Représentation de données issues du mélange de 3 sources en 3 dimensions. L'ensemble des vecteurs observés x_m est contenu dans le cône rouge engendré par les colonnes de A . Si les données contiennent un vecteur mono-source \tilde{x}_m pour chaque source (*Hypothèse 8*), alors le cône engendré par les données X est confondu avec le cône engendré par A .

L'identification des arêtes du cône $\mathcal{C}(A)$, est basée sur la recherche successive des vecteurs les plus éloignés au sens angulaire. En premier lieu, le cône est défini à partir des deux observations formant le plus grand angle. A chaque itération, la dimension du cône estimé est incrémentée de 1. L'identification d'une nouvelle arête du cône est basée sur l'étude de l'angle formé par les observations avec le cône existant, plus précisément de l'angle formé entre chaque observation et sa projection orthogonale sur le cône existant. Le vecteur observé formant un angle maximum est retenu comme nouvelle arête du cône. Ce processus est répété jusqu'à ce que les L colonnes soient identifiées.

Avant de voir l'algorithme de MASS en détail, on vérifie les propriétés des outils nécessaires à l'étude des angles maxima entre les vecteurs observés.

4.1.2 Critère de séparation

L'objectif de ce paragraphe est de montrer que le critère d'angle maximal permet bien d'identifier les arêtes du cône. Pour simplifier les écritures suivantes, on normalise l'ensemble des vecteurs observés x_m de manière à ce qu'ils soient de longueur unitaire. Cette simplification sans incidence sur la méthode permet de définir l'angle entre deux observations d'indices m_1 et m_2 noté :

$$\text{ang}(x_{m_1}, x_{m_2}) = \cos^{-1} \left(\frac{\langle x_{m_1}, x_{m_2} \rangle}{\|x_{m_1}\| \|x_{m_2}\|} \right) = \cos^{-1} (\langle x_{m_1}, x_{m_2} \rangle), \quad (4.6)$$

où $\langle \cdot, \cdot \rangle$ définit le produit scalaire. De plus, le produit scalaire entre les deux vecteurs observés (non négatifs et de norme unitaire), est compris dans l'intervalle $[0, 1]$. La fonction arccos étant monotone décroissante sur cet intervalle, chercher les observations qui forment un angle maximal est équivalent à chercher les observations ayant un produit scalaire minimal. Cette remarque permet d'alléger davantage les notations et de travailler uniquement avec des produits scalaires.

Nous détaillons dans la suite les deux cas que nous allons rencontrer dans l'algorithme de MASS. Le premier cas est l'étude de l'angle formé par deux vecteurs observés et le second est l'étude de l'angle formé par une observation et sa projection orthogonale sur les arêtes déjà identifiées du cône.

4.1.2.1 Cas de deux vecteurs observés

Tout d'abord, montrons que parmi tous les vecteurs observés, les deux observations ayant le plus petit produit scalaire (*i.e* le plus grand angle) sont mono-sources si l'*Hypothèse 8* est vérifiée. Soit $x_{m_1} = \sum_{\ell=1}^L a_\ell s_{\ell m_1}$ et $x_{m_2} = \sum_{\ell=1}^L a_\ell s_{\ell m_2}$ les deux vecteurs observés étudiés. Notons $\tilde{x}_{m_1} = a_p s_{p m_1}$ et $\tilde{x}_{m_2} = a_q s_{q m_2}$ deux vecteurs observés mono-sources avec $p, q \in \{1, \dots, L\}$ et $p \neq q$.

1. Le produit scalaire entre deux observations mono-sources est défini suivant :

$$\cos(\tilde{x}_{m_1}, \tilde{x}_{m_2}) = s_{p m_1} s_{q m_2} \langle a_p, a_q \rangle. \quad (4.7)$$

2. Le produit scalaire entre deux observations possiblement mélangées est défini suivant :

$$\begin{aligned} \cos(x_{m_1}, x_{m_2}) &= \left\langle \sum_{i=1}^L a_i s_{i m_1}, \sum_{j=1}^L a_j s_{j m_2} \right\rangle = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \langle a_i s_{i m_1}, a_j s_{j m_2} \rangle \\ &= \sum_{\substack{i,j \in \{1, \dots, L\} \\ (i,j) \neq (p,q)}} \langle a_i s_{i m_1}, a_j s_{j m_2} \rangle + \underbrace{\langle a_p s_{p m_1}, a_q s_{q m_2} \rangle}_{= \cos(\tilde{x}_{m_1}, \tilde{x}_{m_2})}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Or les vecteurs a_i et les coefficients $s_{i m_\ell}$ sont non négatifs pour $i \in \{1, \dots, L\}$. On a donc :

$$\langle a_i s_{i m_1}, a_j s_{j m_2} \rangle \geq 0 \quad \forall i, j \in \{1, \dots, L\}. \quad (4.9)$$

On en déduit alors que $\cos(x_{m_1}, x_{m_2}) \geq \cos(\tilde{x}_{m_1}, \tilde{x}_{m_2})$, se qui entraîne :

$$\text{ang}(x_{m_1}, x_{m_2}) \leq \text{ang}(\tilde{x}_{m_1}, \tilde{x}_{m_2}). \quad (4.10)$$

Pour conclure sur ce premier cas, on constate que les deux vecteurs observés formant un angle maximum sont nécessairement mono-sources si l'*Hypothèse 8* est vérifiée. On en déduit la propriété suivante :

Propriété 5 : Si x_p et x_q sont deux vecteurs observés vérifiant la relation :

$$\langle x_p, x_q \rangle = \min_{i,j} \langle x_i, x_j \rangle \quad \forall i, j \in \{1, \dots, M\}, \quad (4.11)$$

alors x_p et x_q sont tous deux mono-sources.

4.1.2.2 Cas d'un vecteur observé et de sa projection

Nous avons évoqué précédemment que les arêtes du cône $\mathcal{C}(A)$ (*i.e.* les colonnes de A) sont identifiées itérativement. Notons \tilde{A} la matrice formée par les colonnes estimées à un instant donné de l'algorithme. On constate que $\mathcal{C}(\tilde{A})$ est un sous cône de $\mathcal{C}(A)$. La seconde démonstration nécessaire à notre méthode est de garantir que l'observation formant un angle maximal avec sa projection sur le sous-espace engendré par les colonnes de \tilde{A} est mono-source si l'*Hypothèse 8* est vérifiée (et bien évidemment s'il reste des arêtes non identifiées).

Soit $\tilde{A} = [\hat{a}_1, \dots, \hat{a}_p]$ la matrice des p arêtes déjà identifiées, $p \in \{2, \dots, L-1\}$. Soit $\Pi = \tilde{A}(\tilde{A}^T \tilde{A})^{-1} \tilde{A}^T$ la matrice de projection orthogonale sur le sous-espace engendré par \tilde{A} . On note m_ℓ l'indice de l'observation étudiée. Si l'observation d'indice m_ℓ est mono-source, on la note $\hat{x}_{m_\ell} = a_q s_{qm_\ell}$.

1. L'angle entre une observation mono-source et sa projection sur le sous-espace engendré par \tilde{A} vérifie :

$$\cos(\tilde{x}_{m_\ell}, \Pi \tilde{x}_{m_\ell}) = \langle a_q s_{qm_\ell}, \Pi a_q s_{qm_\ell} \rangle. \quad (4.12)$$

2. L'angle entre une observation possiblement mélangée et sa projection le sous-espace engendré par \tilde{A} vérifie :

$$\begin{aligned} \cos(x_{m_\ell}, \Pi x_{m_\ell}) &= \left\langle \sum_{i=1}^L a_i s_{im_\ell}, \sum_{j=1}^L \Pi a_j s_{jm_\ell} \right\rangle = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \langle a_i s_{im_\ell}, \Pi a_j s_{jm_\ell} \rangle \\ &= \sum_{\substack{i,j \in \{1, \dots, L\} \\ (i,j) \neq (q,q)}} \langle a_i s_{im_\ell}, \Pi a_j s_{jm_\ell} \rangle + \underbrace{\langle a_q s_{qm_\ell}, \Pi a_q s_{qm_\ell} \rangle}_{= \cos(\tilde{x}_{m_\ell}, \Pi \tilde{x}_{m_\ell})}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Puisque les vecteurs a_j et les coefficients s_{jm_ℓ} sont non négatifs, on admet ici que le vecteur projeté $\Pi a_j s_{jm_\ell}$ est dans l'orthant positif. On a donc :

$$\langle a_i s_{im_\ell}, \Pi a_j s_{jm_\ell} \rangle \geq 0 \quad \forall i, j \in \{1, \dots, L\}. \quad (4.14)$$

On en déduit alors que $\cos(x_{m_\ell}, \Pi x_{m_\ell}) \geq \cos(\tilde{x}_{m_\ell}, \Pi \tilde{x}_{m_\ell})$, se qui entraîne :

$$\text{ang}(x_{m_\ell}, \Pi x_{m_\ell}) \leq \text{ang}(\tilde{x}_{m_\ell}, \Pi \tilde{x}_{m_\ell}). \quad (4.15)$$

Pour conclure sur ce second cas, on constate que l'observation formant un angle maximal avec sa projection sur le sous-espace associé au cône $\mathcal{C}(\tilde{A})$ déjà identifié est nécessairement mono-source si l'*Hypothèse 8* est vérifiée. On en déduit la propriété suivante :

Propriété 6 : Si le vecteur observé x_q vérifie la relation :

$$\langle x_q, \Pi x_q \rangle = \min_i \langle x_i, \Pi x_i \rangle \quad \forall i \in \{1, \dots, M\}. \quad (4.16)$$

alors x_q est mono-source.

Nous avons donc montré que le critère d'angle maximal permet la séparabilité des sources si les sources sont accessibles, au sens de l'*Hypothèse 8*. Dans la section suivante, nous détaillons l'algorithme complet de MASS basé sur l'étude des angles formés par les observations.

4.2 La méthode MASS

L'approche géométrique que nous proposons pour résoudre le problème de SAS procède en deux temps. Tout d'abord l'identification des arêtes du cône $\mathcal{C}(X)$ engendré par les données permet d'estimer les colonnes de la matrice de mélange A aux indéterminations standard de la SAS près. Ensuite, les sources sont reconstruites par moindres carrés non négatifs.

4.2.1 Estimation de la matrice de mélange

L'estimation de la matrice de mélange par l'algorithme MASS est elle-même décomposée en deux parties distinctes. Dans un premier temps, on estime les deux premières colonnes de la matrice de mélange en identifiant parmi toutes les observations les plus éloignées au sens angulaire. Cette première étape permet de construire une base du sous-espace engendré par les deux premières colonnes de \tilde{A} , permettant ainsi l'identification de toutes les autres colonnes. Dans un second temps, on identifie successivement chaque colonne manquante en procédant par projection successive des vecteurs observés sur le sous-espace associé au cône $\mathcal{C}(\tilde{A})$ déjà identifié. On rappelle qu'avant toute chose, les vecteurs observés sont normalisés tels que $\|x_m\|_2 = 1, \forall m \in \{1, \dots, M\}$.

4.2.1.1 Les deux premières colonnes de A

Les deux premières colonnes de la matrice de mélange correspondent à la paire de vecteurs observés formant le plus grand angle. Notons x_{m_1} et x_{m_2} cette paire de vecteurs. On a :

$$(m_1, m_2) = \underset{i,j}{\operatorname{argmin}} \langle x_i, x_j \rangle \quad \forall i, j \in \{1, \dots, M\}. \quad (4.17)$$

Selon la *Propriété 5*, ces deux observations sont mono-sources. Ces deux colonnes de X sont donc l'estimation de deux colonnes de A à un facteur près. On note $\tilde{A} = [x_{m_1}, x_{m_2}]$ la matrice formée par ces deux observations. \tilde{A} est construite à partir de deux arêtes $\mathcal{C}(A)$ et elle engendre un cône $\mathcal{C}(\tilde{A})$, sous cône de $\mathcal{C}(A)$.

4.2.1.2 Toutes les autres

La seconde étape dans l'estimation de la matrice de mélange est d'identifier le vecteur observé qui forme le plus grand angle avec les colonnes de \tilde{A} . Ce vecteur est défini comme étant celui formant le plus grand angle avec sa projection orthogonale sur le sous-espace associé au cône $\mathcal{C}(\tilde{A})$. Soit $\Pi_{\tilde{A}}(X)$ la projection des colonnes de X sur le sous-espace associé au cône engendré par les colonnes de \tilde{A} :

$$\Pi_{\tilde{A}}(X) = \tilde{A}(\tilde{A}^T \tilde{A})^{-1} \tilde{A}^T X. \quad (4.18)$$

Notons m_3 l'indice de la colonne suivante de la matrice de mélange. Elle est identifiée suivant :

$$m_3 = \underset{i}{\operatorname{argmin}} \langle x_i, \pi_i \rangle \quad \forall i \in \{1, \dots, M\} \quad (4.19)$$

où π_i est la $i^{\text{ème}}$ colonne de $\Pi_{\tilde{A}}(X)$. Selon la *Propriété 6*, cette observation est mono-source et donne une estimation d'une colonne de A à un facteur près. La nouvelle estimation de la matrice de mélange est $\tilde{A} = [x_{m_1}, x_{m_2}, x_{m_3}]$. La dimension du cône $\mathcal{C}(\tilde{A})$ associé est donc incrémentée de 1. Cette procédure de projection / identification est ensuite répétée jusqu'à l'identification des L colonnes de la matrice de mélange. Au final, la matrice de mélange est complètement estimée :

$$\hat{A} = [x_{m_1}, \dots, x_{m_L}]. \quad (4.20)$$

Notons que les colonnes de \hat{A} sont obtenues dans un ordre arbitraire et sont toutes de norme unitaire (*i.e.* on retrouve les indéterminations de permutation et d'échelle classiques en SAS).

L'idée globale de MASS est de construire une estimation de la matrice de mélange directement à partir des données observées. Cependant, les données réelles étant contaminées par du bruit, cette estimation peut être assez éloignée de la solution désirée. Dans le paragraphe suivant nous proposons une solution pour diminuer l'impact du bruit sur la qualité des résultats.

4.2.1.3 Prise en compte du bruit

Avec la procédure décrite jusqu'ici, l'estimation de la matrice de mélange est très sensible au bruit puisque les colonnes de \hat{A} sont des vecteurs observés "bruts". Pour rendre l'estimation plus robuste, nous proposons une extension de l'algorithme précédent en introduisant une marge de tolérance dans la sélection des colonnes de X (Eq. (4.17) et Eq. (4.19)). Au lieu de sélectionner la colonne qui a le plus grand angle avec sa projection (ou les deux premières colonnes qui forment le plus grand angle), nous sélectionnons toutes les colonnes qui sont quasiment colinéaires à la colonne identifiée avec la méthode ci-dessus. L'introduction de cette marge de tolérance permet de prendre en compte le cas où plusieurs vecteurs mono-sources, relatifs à la même source, sont présents dans les données observées. Pour chaque colonne x_{m_ℓ} précédemment identifiée selon Eq. (4.17) ou Eq. (4.19), on construit l'ensemble \mathcal{A}_ℓ :

$$\mathcal{A}_\ell = \{x_i \mid \langle x_{m_\ell}, x_i \rangle \geq \kappa\} \quad i \in \{1, \dots, M\}, \ell \in \{1, \dots, L\} \quad (4.21)$$

où κ est un seuil de tolérance choisi proche de 1 pour éviter de sélectionner des observations mélangées (typiquement $\kappa = 0.99$). La matrice de mélange est obtenue en moyennant les colonnes de chaque ensemble \mathcal{A}_ℓ ce qui réduit l'influence du bruit :

$$\hat{A} = [\bar{\mathcal{A}}_1, \dots, \bar{\mathcal{A}}_L] \quad (4.22)$$

où $\bar{\mathcal{A}}_\ell$ est la colonne moyenne de l'ensemble \mathcal{A}_ℓ .

4.2.2 Reconstruction des sources

L'étape finale de la méthode consiste à estimer les L sources spatiales à partir des spectres élémentaires et des observations, sous la contrainte de non négativité. Cette procédure est identique à celle utilisée pour les méthodes SpaceCORR et MC-NMF détaillées dans le chapitre précédent. Le lecteur peut se reporter à la Section 3.2.1.3 illustrant l'utilisation de l'algorithme NNLS [88] dans notre contexte.

Par ailleurs, à l'issue de notre étude, il nous est apparu qu'une procédure de ce type pour l'identification des arêtes d'un cône simplicial a aussi été présentée dans un contexte de reconnaissance de forme [82]. Les auteurs proposent une méthode appelée EVA (pour *Extreme Vector Algorithm* en anglais) dans le but d'améliorer l'identification des composantes les plus représentatives d'un jeu de données. On souligne que la méthode MASS est appliquée sur des données hyperspectrales dans un contexte de SAS. De plus, nous avons apporté une preuve de la séparabilité des observations avec le critère d'angle maximum (voir Section 4.1.2), et notre méthode inclut une étape supplémentaire pour être robuste au bruit. Enfin, une autre approche de SAS fondée sur les vecteurs extrêmes et appliquée en imagerie biomédicale a récemment été publiée [110].

En pratique, l'algorithme de MASS se résume donc à :

Entrées : X l'ensemble des spectres observés, L le nombre de sources.

Sorties : A les spectres élémentaires, S les cartes sources.

1. Normalisation des vecteurs observés tels que $\|x_m\|_2 = 1, \forall m \in \{1, \dots, M\}$.
2. Estimation des deux premières colonnes de \tilde{A} avec Eq. (4.17).
3. Estimation des colonnes suivantes par projection sur \tilde{A} avec Eq. (4.19).
4. Répétition de l'étape 3 jusqu'à l'obtention des L colonnes de \tilde{A} .
5. Construction des L ensembles \mathcal{A}_ℓ avec Eq. (4.21).
6. Estimation des colonnes de \hat{A} avec Eq. (4.22).
7. Reconstruction des sources S par minimisation du critère Eq. (3.6) (NNLS).

4.3 Méthodes hybrides

Nous présentons ici les variantes hybrides de la méthode MASS. Dans le chapitre précédent, nous avons utilisé les résultats de SpaceCORR pour initialiser la MC-NMF et ainsi obtenir

une qualité de séparation supérieure aux deux méthodes utilisées séparément. Nous réutilisons ce concept ici avec la méthode MASS.

Dans des conditions favorables, la méthode MASS donne une décomposition parfaite du cube de données. On entend par conditions favorables le fait que les données présentent au moins une observation mono-source par source et que les données ne sont pas bruitées. En pratique, ces conditions peuvent ne pas être réalistes. Dans des conditions réelles, les observations retenues comme estimations des arêtes du cône $\mathcal{C}(A)$ peuvent être contaminées par la présence, faible mais non négligeable, d’une ou plusieurs autres sources. Dans ce cas, la décomposition obtenue par MASS n’est pas idéale mais donne une bonne approximation des “vraies” sources ainsi que de leurs coefficients de mélange associés.

Pour améliorer la décomposition du cube de données, ces approximations sont affinées en initialisant la MC-NMF avec les spectres \hat{A} ou les cartes d’abondance \hat{S} obtenues avec MASS.

Au même titre que les versions hybrides de SpaceCORR (voir Section 3.2.3), on précise qu’initialiser la NMF à la fois avec les spectres et les cartes est inutile, les résultats obtenus étant identiques à ceux obtenus en initialisant la NMF uniquement avec les cartes. Ainsi, lors de l’initialisation de la NMF, les coefficients de la matrice A ou S laissée libre sont générés suivant une distribution uniforme sur l’intervalle $[0, 1]$.

Le choix d’initialisation par les spectres ou par les cartes sera discuté dans la Section 4.4.4. La version hybride utilisant l’initialisation par les spectres est appelée MASS-NMF-Spec, et la version utilisant l’initialisation par les cartes est appelée MASS-NMF-Map.

Pour conclure, les méthodes hybrides proposées permettent une tolérance sur la qualité mono-source des vecteurs observés retenus comme arêtes du cône, tout en réduisant la variabilité des solutions données par la MC-NMF.

4.4 Résultats expérimentaux sur données synthétiques

Dans cette section, nous réalisons un ensemble de tests pour évaluer les performances des méthodes en fonction du rapport signal sur bruit, du taux de parcimonie conjointe des données et du nombre de sources. Les tests sur données synthétiques sont les mêmes que ceux réalisés avec la méthode SpaceCORR. On utilise les mêmes cubes de données précédents et les résultats sont présentés sous la même forme (pour plus de détails, voir Section 3.3.3).

Ainsi, chacune des trois méthodes décrites précédemment (MASS Section 4.2, MASS-NMF-Spec et MASS-NMF-Map Section 4.3) est appliquée sur l’ensemble des 45 cubes synthétiques avec pour chaque cube, 100 réalisations de bruit (voir Section 3.3.1 pour plus de détails sur la construction de ces données synthétiques).

Pour chaque méthode, nous montrons comme précédemment une figure présentant le SAM et NRMSE moyen obtenu sur chacun des 45 cubes. Une seconde figure permet l’étude de la dispersion des solutions données par les méthodes hybrides. Enfin pour chaque méthode, on illustre nos commentaires par l’étude d’un cas pratique montrant un spectre élémentaire extrait ainsi que la carte de la source spatiale associée, ceci dans les deux cas de distance extrême $d = 6$ et $d = 2$. Le cas pratique utilisé pour illustrer les résultats est toujours le même quel que soit la méthode utilisée, ceci pour faciliter les comparaisons des différentes méthodes. Il s’agit de la seconde source du cube contenant 4 sources et un SNR de 20 dB.

On rappelle que la figure montrant les résultats globaux est composée de 6 cadrants disposés en deux lignes et trois colonnes. La première ligne donne le SAM et la seconde le NRMSE. La première colonne concerne les cubes contenant 2 sources, celle du milieu ceux contenant 4 sources et la dernière ceux contenant 6 sources. Au sein de chaque cadrant, l'axe des abscisses donne la distance d définissant le recouvrement des sources spatiales, de $d = 6$ à $d = 2$ (sens de variation décroissant). Les trois courbes représentent chacun des trois niveaux de bruit testés dans cette étude à savoir : bleue pour un SNR de 30 dB, rouge pour un SNR de 20 dB et noire pour un SNR de 10 dB. La figure illustrant la dispersion des solutions est composée de 6 cadrants disposés comme précédemment donnant la mesure de dispersion NMCEB. La ligne du haut illustre le $\text{NMCEB}^{\text{mean}}$ et la ligne du bas le $\text{NMCEB}^{\text{max}}$ pour chacun des 45 cubes.

4.4.1 MASS

Les performances globales atteintes par MASS sur les 45 cubes avec pour chacun, 100 réalisations de bruit, sont montrées sur la Figure 4.2.

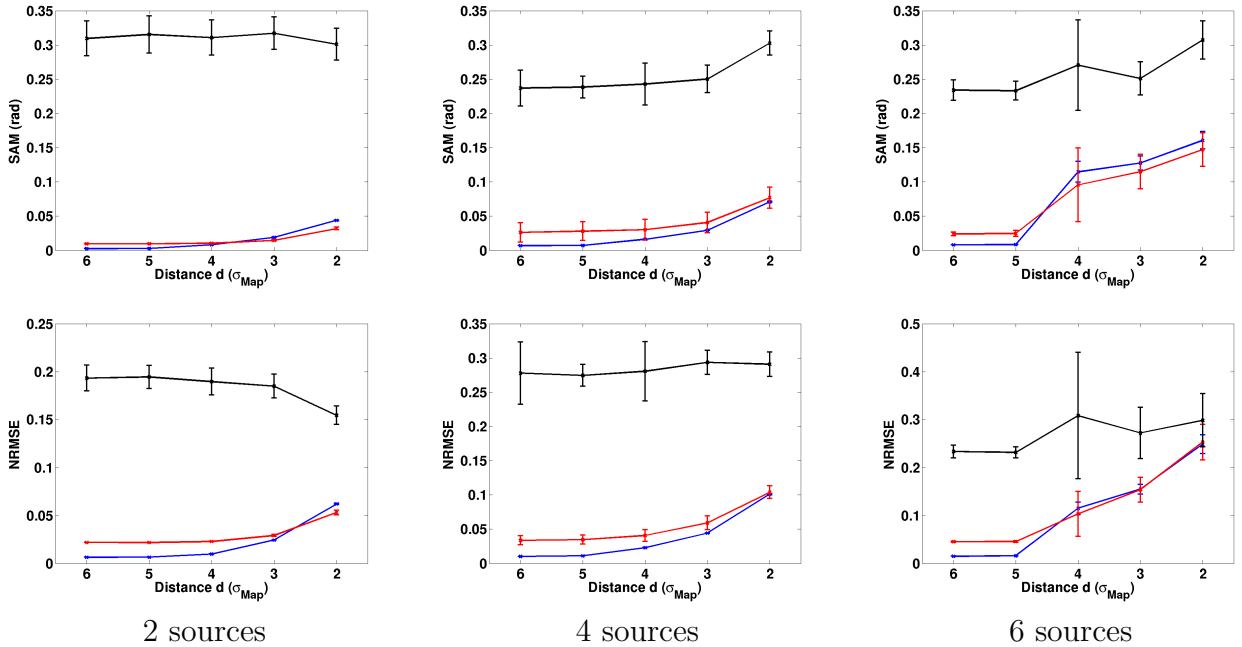


FIGURE 4.2 – Performances atteintes par MASS sur les 45 cubes synthétiques pour les 100 réalisations de bruit avec un SNR de 30 dB (en bleu), 20 dB (en rouge) et 10 dB (en noir). Les barres d'erreur donne l'écart type suivant les 100 réalisations de bruit.

Parcimonie Les résultats de MASS en fonction du degré de parcimonie sont relativement stables pour les mélanges de 2 et 4 sources. Pour des distances allant de $d = 6$ à $d = 3$, les performances sont excellentes pour des niveaux de bruit de 30 et 20 dB. Le SAM est

inférieur à 0,04 rad et le NRMSE est inférieur à 5 %. On note une légère dégradation des performances pour $d = 2$ avec une augmentation du SAM comprise entre 0,03 et 0,05 rad et une augmentation du NRMSE comprise entre 3 % et 7 %.

Les résultats obtenus avec les mélanges contenant 6 sources se dégradent à partir d'une distance plus grande. Pour $d = 6$ et $d = 5$, on observe des performances similaires aux autres cas. Puis entre $d = 5$ et $d = 2$, on constate une nette augmentation du SAM de 0,1 rad et du NRMSE de 15 %.

Bien que les performances soient moins bonnes avec les mélanges à 10 dB de bruit, on observe globalement la même évolution du SAM et du NRMSE en fonction de d . On remarque cependant, que le NRMSE des cubes contenant 2 sources diminue en fonction de d ce qui rappelle la tendance rencontrée avec la MC-NMF (Figure 3.8).

Nombre de sources Concernant les mélanges ayant un niveau de bruit de 30 et 20 dB, on observe des performances très proches lors du passage de 2 à 4 sources. Dans les cas les moins parcimonieux, on note une légère augmentation du SAM de 0,03 rad et du NRMSE de 4 %. Lors du passage de 4 à 6 sources, les performances sont identiques dans les cas idéaux $d = 6$ et $d = 5$, mais se dégradent plus franchement par la suite pour atteindre une différence pour le SAM de 0,1 rad et pour le NRMSE de 12 %.

Les résultats obtenus sur les mélanges ayant un niveau de bruit de 10 dB de bruit sont proches lors du passage de 4 à 6 sources. En revanche, le cas des mélanges de 2 sources est incohérent. Le NRMSE augmente en moyenne de 10 %, par contre le SAM diminue de 0,06 rad dans le même temps.

Niveau de bruit On remarque que MASS est robuste aux niveaux de bruit les plus favorables. Pour les mélanges contenant 20 ou 30 dB de bruit, les performances sont quasiment identiques avec une différence de SAM de 0,02 rad et de NRMSE de 3 % au maximum. En revanche, on observe une nette dégradation des performances lorsque l'on passe à 10 dB de bruit. En effet, quel que soit le nombre de sources ou le taux de parcimonie, on note une augmentation du SAM comprise entre 0,2 et 0,3 rad pour une augmentation du NRMSE allant de 15 à 25 %.

En ce qui concerne les 100 réalisations de bruit, on constate que les résultats de MASS peuvent grandement varier selon les cas. Pour les mélanges de 2 ou 4 sources avec un niveau de bruit raisonnable ou encore les mélanges contenant 6 sources et un taux élevé de parcimonie, ces variations sont faibles avec un écart type maximum de 0,01 rad pour le SAM et 1 % pour le NRMSE. En revanche, la variabilité des résultats devient conséquente pour les mélanges contenant 10 dB de bruit. On note, sur la Figure 4.2, un écart type de 0,04 rad pour le SAM et 5 % pour le NRMSE avec les mélanges contenant 2 ou 4 sources. Pour les mélanges de 6 sources, ces variations restent du même ordre avec une exception, que l'on retrouve pour tous les niveaux de bruit. En effet pour $d = 4$, l'écart type est doublé par rapport aux distances $d = 5$ et $d = 6$.

Cas pratique Les résultats du cas pratique, pour les deux positions extrêmes, sont montrés sur la Figure 4.6 ainsi que dans le Tableau 4.1.

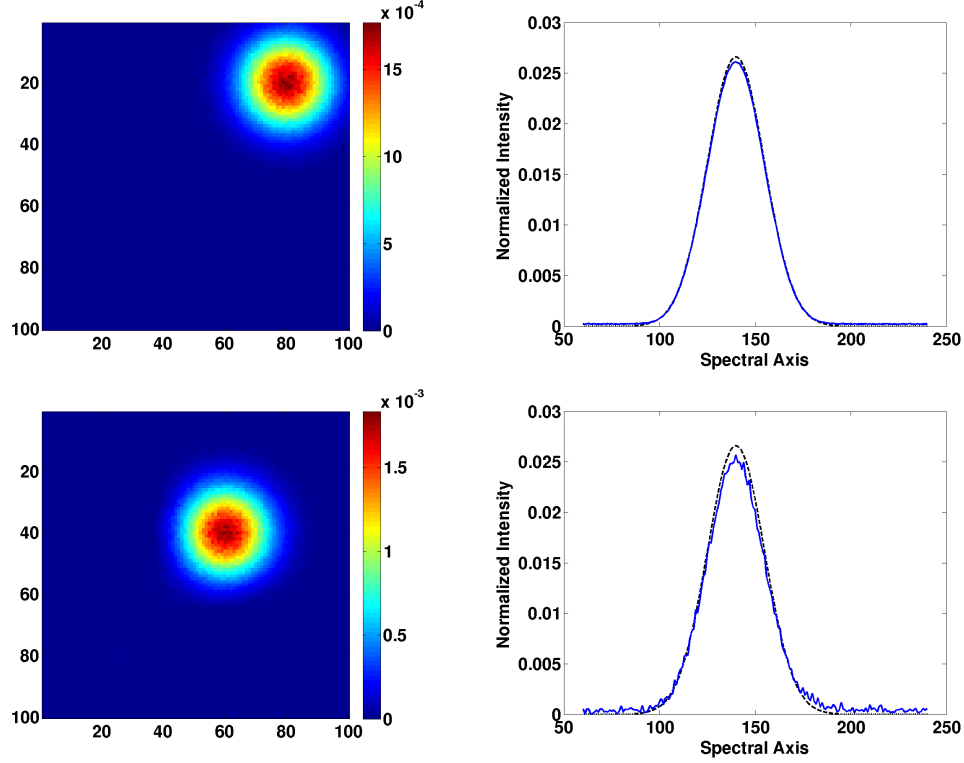


FIGURE 4.3 – Exemple de résultats obtenus par MASS dans le cas le plus parcimonieux (ligne du haut) et le moins parcimonieux (ligne du bas). Le spectre estimé est en bleu et le spectre de référence est en tirets noirs.

Dans le cas le plus favorable ($d = 6$), on constate que les performances de MASS sont excellentes. Le NRMSE obtenue est de 2,18 % et le SAM est de 0,015 rad. Le spectre obtenu est parfaitement lisse alors que le SNR est de 20 dB. On notera cependant que le pic d'intensité du spectre est légèrement sous estimé.

Dans le cas le moins parcimonieux ($d = 2$), on constate que le spectre obtenu est contaminé par un bruit résiduel. La position, la largeur de la raie sont quant à elles correctement estimées est on n'observe pas de présence résiduelle d'autre composante. Le bruit toujours présent est dû au choix de l'angle de tolérance dans l'estimation des colonnes de la matrice de mélanges. Le choix de ce seuil est un compromis entre le bruit résiduel et la présence d'autres composantes résiduelles. Il dépend du nombre d'observations effectivement mono-sources présentes dans les données, faible dans ce cas défavorable.

La source spatiale associé est quant à elle correctement estimée, elle est circulaire, à la bonne position et on notera l'absence de source résiduelle. Les performances atteintes par MASS dans ce cas restent acceptables (7,29 % pour le NRMSE et 0,049 rad pour le SAM) compte tenu du niveau de bruit et du faible nombre d'observations mono-sources dans les données.

Bilan En résumé, MASS donne d'excellents résultats dans le cas de données suffisamment parcimonieuses et en présence d'un niveau de bruit raisonnable (20 ou 30 dB). On constate

	$d = 6\sigma_{Map}$	$d = 2\sigma_{Map}$
$\text{NRMSE}_{\ell=2}$	2,18 %	7,29 %
$\text{SAM}_{\ell=2}$ (rad)	0,015	0,049

TABLE 4.1 – Mesures de performances associées aux résultats obtenus par MASS sur le cas pratique (2^{ième} source du cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB).

de plus que pour les mélanges de 2 ou 4 sources, les résultats sont corrects même dans les conditions les moins favorables de parcimonie, toujours avec un bruit de 20 ou 30 dB.

Le principal inconvénient mis en évidence par les tests sur données synthétiques est la sensibilité de la méthode au niveau élevé de bruit. En effet, les performances pour les mélanges contenant 10 dB de bruit sont faibles, même dans des conditions optimales de parcimonie. Cette sensibilité provient de la structure même de la méthode qui réalise l'estimation de la matrice de mélange en sélectionnant directement les colonnes à partir des vecteurs observés. L'introduction d'un angle de tolérance dans cette sélection a un effet conséquent sur les niveaux de bruit raisonnables mais devient moins efficace pour des niveaux de bruit plus conséquents. Par ailleurs, réduire le seuil de tolérance permettrait une plus grande robustesse au bruit, au détriment de la séparation des composante. Des observations non mono-sources seraient alors utilisées dans l'estimation des colonnes de la matrices de mélange.

La sensibilité de MASS au niveau de bruit peut être atténuée par l'hybridation avec la MC-NMF, comme nous allons le montrer.

4.4.2 MASS-NMF-Spec

Les performances globales atteintes par MASS-NMF-Spec sur les 45 cubes avec pour chacun, 100 réalisations de bruit, sont montrées sur la Figure 4.4. On constate qu'elles suivent la même tendance quel que soit le nombre de sources présentes dans les données. Tout comme la méthode hybride SCA-NMF-Spec (Figure 3.11), les courbes de performances ont la même forme que celles obtenues avec la MC-NMF seule dans le cas de deux sources (Figure 3.8). L'évolution des performances qui y est montrée est contre intuitive en fonction de la distance d .

Parcimonie Dans le cas des mélanges contenant 2 ou 4 sources, les performances n'évoluent pas pour des distances allant de $d = 6$ à $d = 3$. Dans le cas de $d = 2$, on note une diminution du SAM de 0,03 rad et du NRMSE de 5 %. Le cas des mélanges de 6 sources est assez similaire, on notera cependant une amélioration des performances dès $d = 5$. Entre $d = 5$ et $d = 2$, le SAM diminue de 0,025 rad et le NRMSE de 4 %.

Nombre de sources Les performances de MASS-NMF-Spec sont relativement stables en fonction du nombre de sources. Lorsque l'on passe de 2 à 4 sources, le SAM augmente globalement de 0,02 rad (on remarque que le cas des mélanges à 10 dB est identique dans ce cas) et le NRMSE augmente de 5 %. Le passage de 4 à 6 sources dégrade les performances de 0,01 rad pour le SAM (0,02 rad dans le cas à 10 dB) et de 3 % pour le NRMSE.

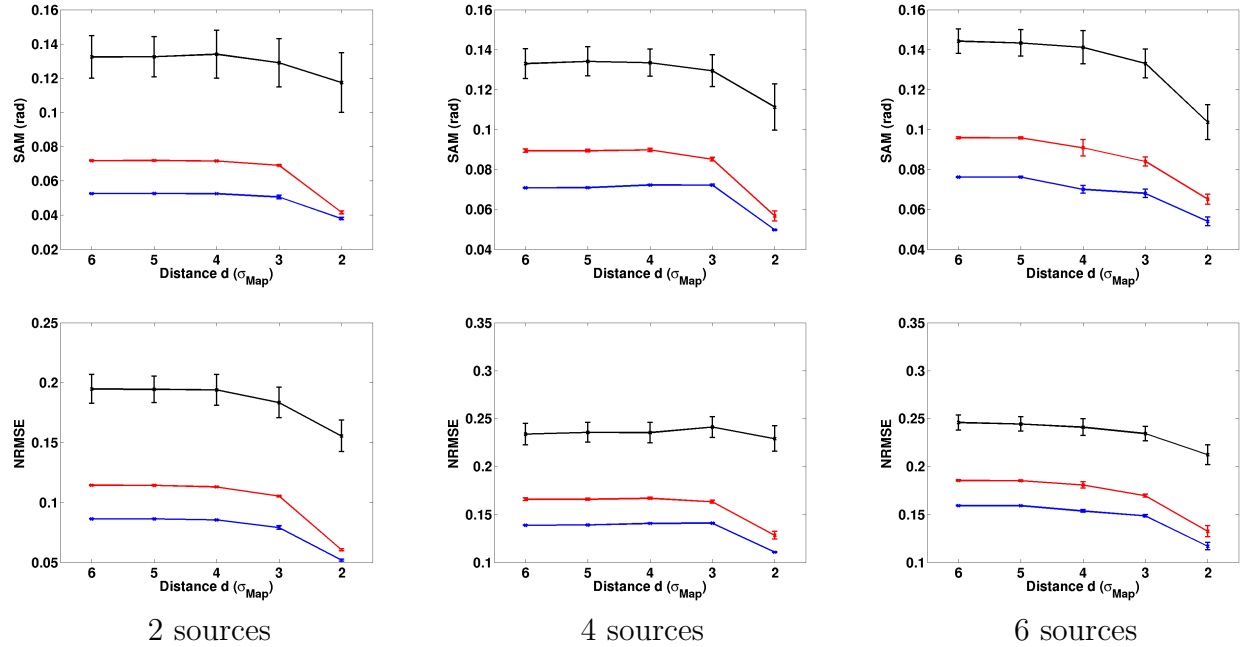


FIGURE 4.4 – Performances atteinte par MASS-NMF-Spec sur les 45 cubes synthétiques pour 100 réalisations de bruit avec un SNR de 30 dB (en bleu), 20 dB (en rouge) et 10 dB (en noir). Les barres d'erreur donne l'écart type suivant les 100 réalisations de bruit.

Niveau de bruit On constate que la version hybride MASS-NMF-Spec est sensible au bruit au même titre que la méthode MASS utilisée seule. Cependant, on note que la dégradation des performances en fonction du SNR est bien moindre ici. Pour un SNR passant de 30 à 20 dB, le SAM augmente d'environ 0,02 rad et le NRMSE de 3 %. Lorsque le SNR passe de 20 à 10 dB, le SAM augmente d'environ 0,05 rad et le NRMSE de 7 %.

En ce qui concerne les 100 réalisations de bruit, on observe une nette amélioration de la variabilité par rapport à la méthode MASS utilisée seule. Pour les mélanges à 30 et 20 dB, la méthode devient très stable, les barres d'erreur sont négligeables (elles persistent toujours dans le cas particulier du mélange de 6 sources à $d = 4$). Les solutions des mélanges à 10 dB varient toujours en fonction des réalisations de bruit mais dans une moindre mesure. On note un écart type de 0,02 rad du SAM et de 2 % du NRMSE pour les mélanges de 2 sources. Cette variabilité diminue pour les mélanges de 4 et 6 sources avec un écart type de 0,01 rad du SAM et de 1 % pour le NRMSE.

Barres d'erreur L'amplitude des barres d'erreur de l'analyse Monte Carlo associée à MASS-NMF-Spec est détaillée sur la Figure 4.5.

De nouveau, on observe les mêmes tendances que celles rencontrées précédemment avec la MC-NMF seule et les méthodes hybrides issues de SpaceCORR. La dispersion de MASS-NMF-Spec augmente avec le nombre de sources, le degré de parcimonie et le niveau de bruit dans les données. On constate également que les taux de dispersion sont équivalents à ceux observés avec la méthode SCA-NMF-Spec (Figure 3.12).

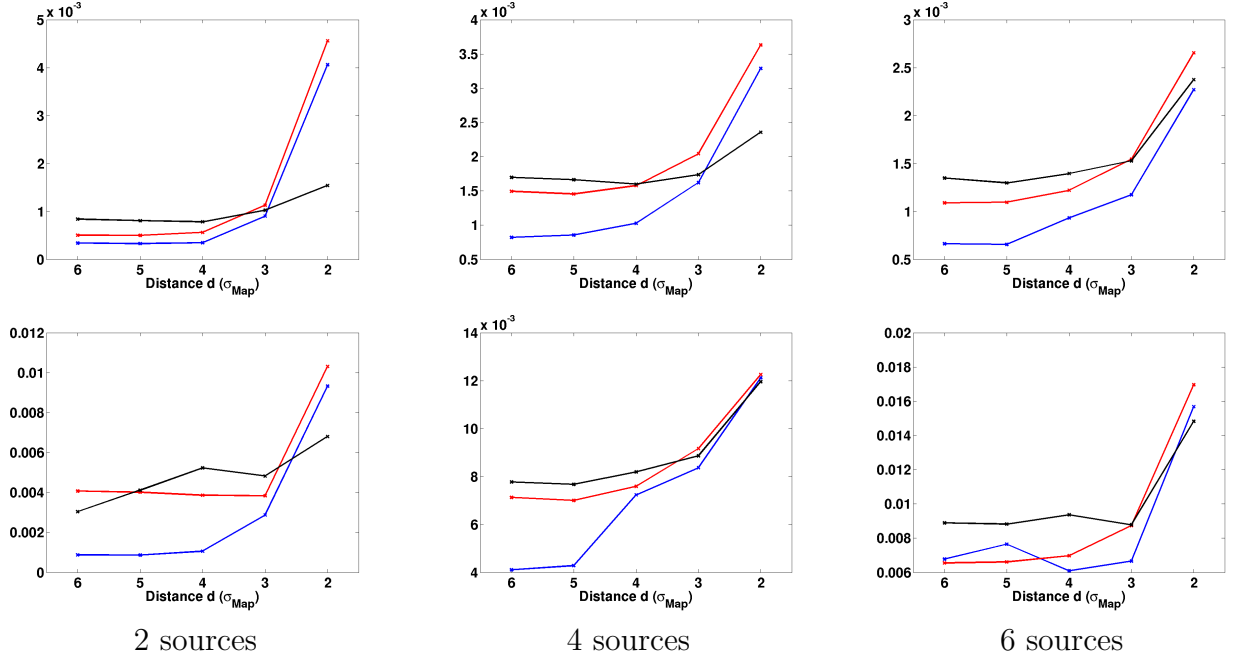


FIGURE 4.5 – Dispersion des solutions de MASS-NMF-Spec obtenues sur les 45 cubes synthétiques avec 100 réalisations de bruit. La ligne du haut illustre le $\text{NMCEB}^{\text{mean}}$ et la ligne du bas le $\text{NMCEB}^{\text{max}}$.

En moyenne, la dispersion des solutions varie entre 0,02 % et 0,2 % du maximum d'intensité pour des distances comprises entre $d = 6$ et $d = 3$. Dans le pire cas où $d = 2$, elle atteint 0,45 % du maximum d'intensité en moyenne. Le maximum de l'enveloppe de dispersion est également faible dans tous les cas. Il varie entre 0,1 % et 0,85 % pour des distances comprises entre $d = 6$ et $d = 3$, quel que soit le nombre de sources ou le niveau de bruit considéré. Dans le cas le moins favorable, le maximum atteint 1,8 % du maximum d'intensité.

Cas pratique Les résultats du cas pratique, pour les deux positions extrêmes sont montrés sur la Figure 4.6 ainsi que dans le Tableau 4.2.

Tout d'abord, on remarque que les résultats obtenus sont très proches de ceux rencontrés avec la méthode hybride SCA-NMF-Spec (Figure 3.13). La forme des raies estimées, les artefacts restant sur les sources spatiales ainsi que les critères de performances sont quasiment identiques.

Dans le cas le plus parcimonieux, la raie estimée a une largeur plus faible ce qui entraîne une surestimation du pic d'intensité. La position du pic d'intensité est correctement estimée et la raie obtenue est symétrique. Sur la carte d'abondance on note la présence résiduelle des deux sources voisines.

Dans le cas le moins parcimonieux, on observe une asymétrie de la raie estimée. On remarque la présence résiduelle d'une contribution spectrale sur la partie droite du spectre estimé. Cette asymétrie entraîne une légère erreur dans l'estimation de la position du pic d'intensité. On note la présence résiduelle d'une source voisine.

Dans les deux cas, on note que la source spatiale est correctement positionnée et a une

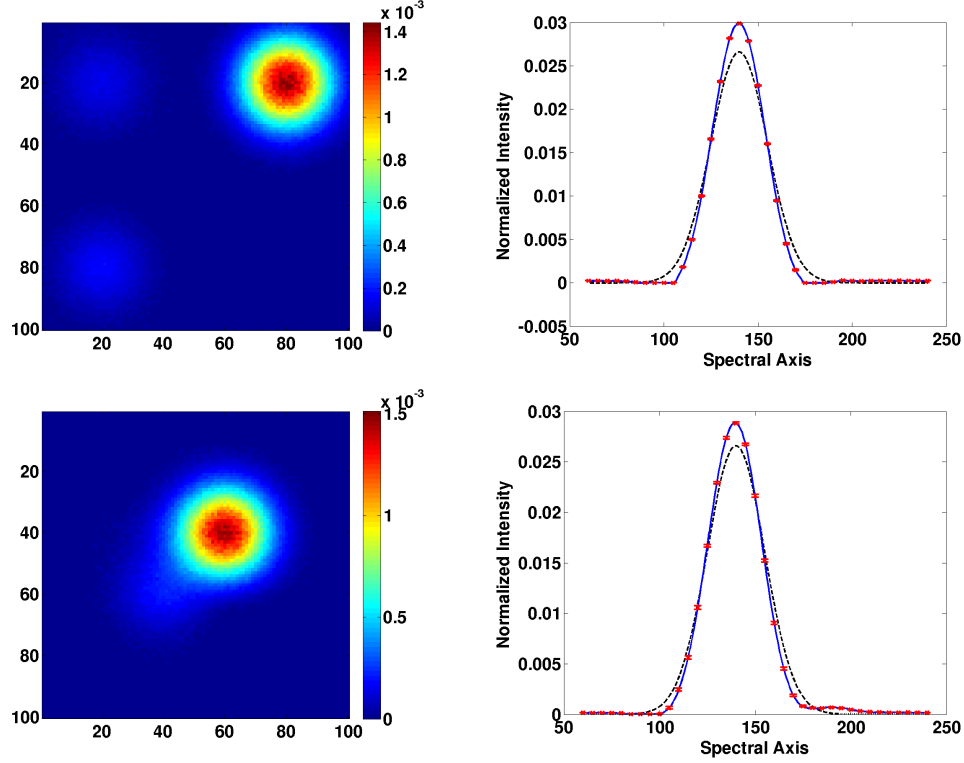


FIGURE 4.6 – Exemple de résultats obtenus par MASS-NMF-Spec dans le cas le plus parcimonieux (ligne du haut) et le moins parcimonieux (ligne du bas). Le spectre estimé est en bleu et le spectre de référence est en tirets noirs. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions suivant l’équation 3.13.

forme régulière, malgré la présence résiduelle d’artefacts (faibles en intensité) et la sous-estimation de l’intensité d’émission (en lien avec la surestimation du pic d’intensité spectrale). Cependant, l’erreur d’estimation reste conséquente dans les deux cas : 21,4 % pour $d = 6$ et 17,15 % pour $d = 2$.

En ce qui concerne les barres d’erreur, on remarque qu’elles sont quasiment négligeables. Dans le cas le plus favorable, la dispersion des solutions de MASS-NMF-Spec est au maximum de 0,58 % du maximum d’intensité pour atteindre 1,18 % dans le pire cas.

	$d = 6\sigma_{Map}$	$d = 2\sigma_{Map}$
$\text{NRMSE}_{\ell=2}$	21,4 %	17.15 %
$\text{SAM}_{\ell=2}$ (rad)	0,101	0,085
$\text{NMCEB}_{\ell=2}^{\text{mean}}$	0,12 %	0,41 %
$\text{NMCEB}_{\ell=2}^{\text{max}}$	0,58 %	1,18 %

TABLE 4.2 – Mesures de performances associées aux résultats obtenus par MASS-NMF-Spec sur le cas pratique ($2^{\text{ième}}$ source du cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB).

Bilan En résumé, cette première version hybride donne des résultats présentant les mêmes caractéristiques que ceux obtenus avec SCA-NMF-Spec (voir Section 3.3.3.3). Nous revenons sur la comparaison entre les versions hybrides de SpaceCORR et de MASS dans la Section 4.4.4.

En comparaison avec la méthode MASS utilisée seule, le principal avantage est une amélioration globale des critères de performances pour les mélanges avec 10 dB de bruit. La méthode MASS utilisée seule dans cette configuration donnait des résultats peu satisfaisants. Ils sont nettement améliorés lors de l'hybridation avec la MC-NMF.

Pour finir, on souligne la nette diminution de la dispersion des solutions données par MASS-NMF-Spec par rapport à celle rencontrée avec la MC-NMF (Figure 3.9). Les barres d'erreur rencontrées ici sont du même ordre de grandeur que celles obtenues avec SCA-NMF-Spec (Figure 3.12).

4.4.3 MASS-NMF-Map

Les performances globales atteintes par MASS-NMF-Map sur les 45 cubes avec pour chacun, 100 réalisations de bruit, sont montrées sur la Figure 4.7. Mis à part le cas des mélanges de 2 sources avec un SNR de 10 dB, on constate qu'elles suivent la même tendance quel que soit le nombre de sources présentes dans les données. On constate que les courbes de performances ont la même forme que celles obtenues avec MASS seule (Figure 4.2), seule les valeurs des mesures de performances changent.

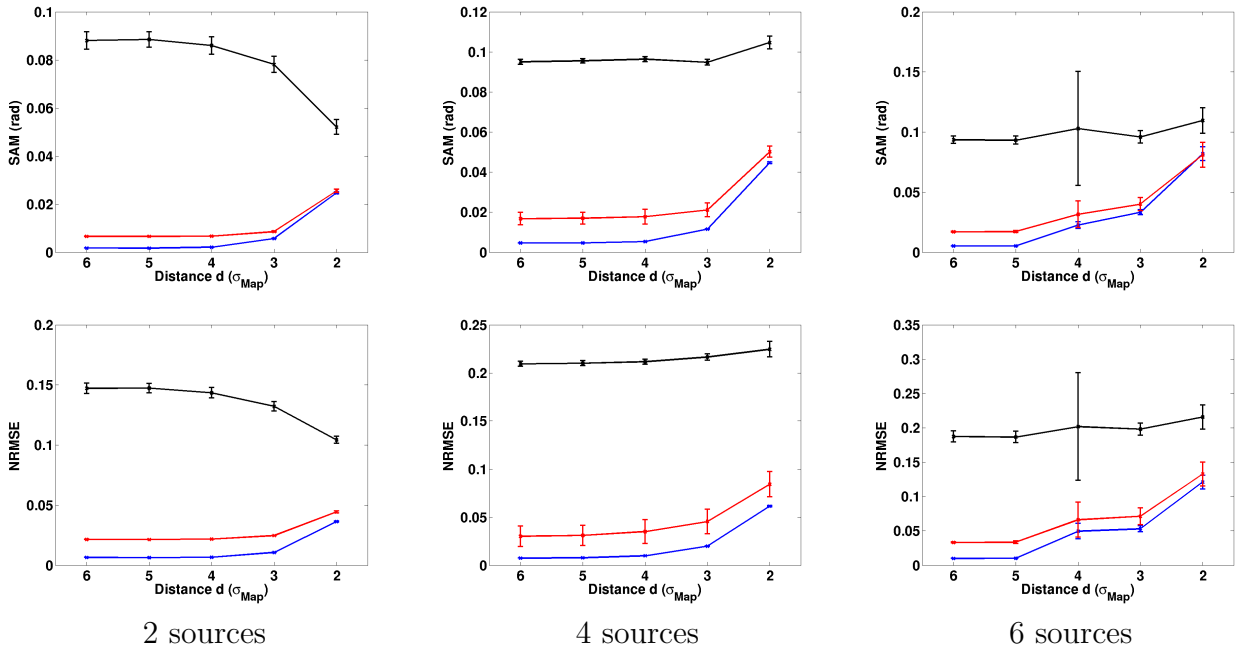


FIGURE 4.7 – Performances atteintes par MASS-NMF-Map sur les 45 cubes synthétiques pour 100 réalisations de bruit avec un SNR de 30 dB (en bleu), 20 dB (en rouge) et 10 dB (en noir). Les barres d'erreur donne l'écart type suivant les 100 réalisations de bruit.

Parcimonie On distingue le cas des mélanges à 10 dB des autres cas. Pour les mélanges contenant 30 et 20 dB de bruit, on constate que cette version hybride reste stable pour des distances allant de $d = 6$ à $d = 3$. Les performances sont, dans ces conditions, excellentes avec un SAM inférieur à 0,02 rad et un NRMSE inférieur à 4 %. Pour le cas le moins parcimonieux ($d = 2$), on observe une augmentation du SAM de 0,03 rad et du NRMSE de 7 %. Pour les mélanges contenant 6 sources, on observe une diminution des performances dès $d = 5$, le SAM augmentant de 0,06 rad et le NRMSE de 13 %.

Concernant les mélanges à 10 dB, on retrouve le cas contre intuitif pour les mélanges de 2 sources avec une diminution du SAM de 0,04 et du NRMSE de 3 %. Les cas contenant 4 et 6 sources donnent des performances relativement stables en fonction de d avec un SAM augmentant de 0,02 rad et un NRMSE augmentant de 2 % entre $d = 6$ et $d = 2$.

Nombre de sources Comme pour la méthode MASS utilisée seule, cette version hybride est peu sensible au nombre de sources présentes dans les données pour les niveaux de bruit de 30 et 20 dB. Pour ces mélanges, on observe une augmentation du SAM de 0,03 rad et du NRMSE de 3 % lors du passage de 2 à 4 pour $d = 2$. Lors du passage de 4 à 6 sources avec $d = 2$, on observe une dégradation des performances du même ordre avec une augmentation du SAM de 0,06 rad et du NRMSE de 3 %.

Le cas des mélanges à 10 dB est moins homogène. Lors du passage de 2 à 4 sources, on note une augmentation du SAM de 0,01 rad et du NRMSE de 7 % entre $d = 6$ et $d = 3$. Pour $d = 2$ la différence est plus conséquente avec un SAM augmentant de 0,04 et un NRMSE augmentant de 10 %. Lors du passage de 4 à 6 sources, le SAM est identique mais on observe une légère diminution du NRMSE de 2 %.

Niveau de bruit Comme pour la méthode MASS utilisée seule, on remarque que cette version hybride est robuste au niveau de bruit de 30 et 20 dB. Dans ces cas et quel que soit le nombre de sources, on observe des performances quasiment identiques avec une différence du SAM de 0,01 rad au maximum et une différence du NRMSE de 3 % au maximum. Concernant les mélanges à 10 dB, on note de nouveau une nette dégradation des performances avec un SAM augmentant de 0,08 rad et une augmentation du NRMSE comprise entre 12,5 et 19 % selon le nombre de sources.

En ce qui concerne les 100 réalisations du bruit, on observe une nette diminution de la variabilité des solutions par rapport à la méthode MASS utilisée seule. Cependant elle reste non négligeable pour les mélanges à 10 dB.

Barres d'erreur Les barres d'erreur de l'analyse Monte Carlo associée à MASS-NMF-Map sont détaillées sur la Figure 4.8.

On rencontre de nouveau deux tendances suivant le niveau de bruit présent dans les données. Dans le cas des mélanges à 30 et 20 dB de bruit, la dispersion des solutions de MASS-NMF-Map est négligeable avec dans le pire cas un écart type de 0,2 % en moyenne et un maximum de l'enveloppe de la dispersion n'excédant pas 0,8 % du maximum d'intensité. Dans le cas des mélanges à 10 dB de bruit, on observe une légère augmentation de la dispersion des solutions de MASS-NMF-Map. Pour les distances comprises entre $d = 6$ et $d = 3$, la

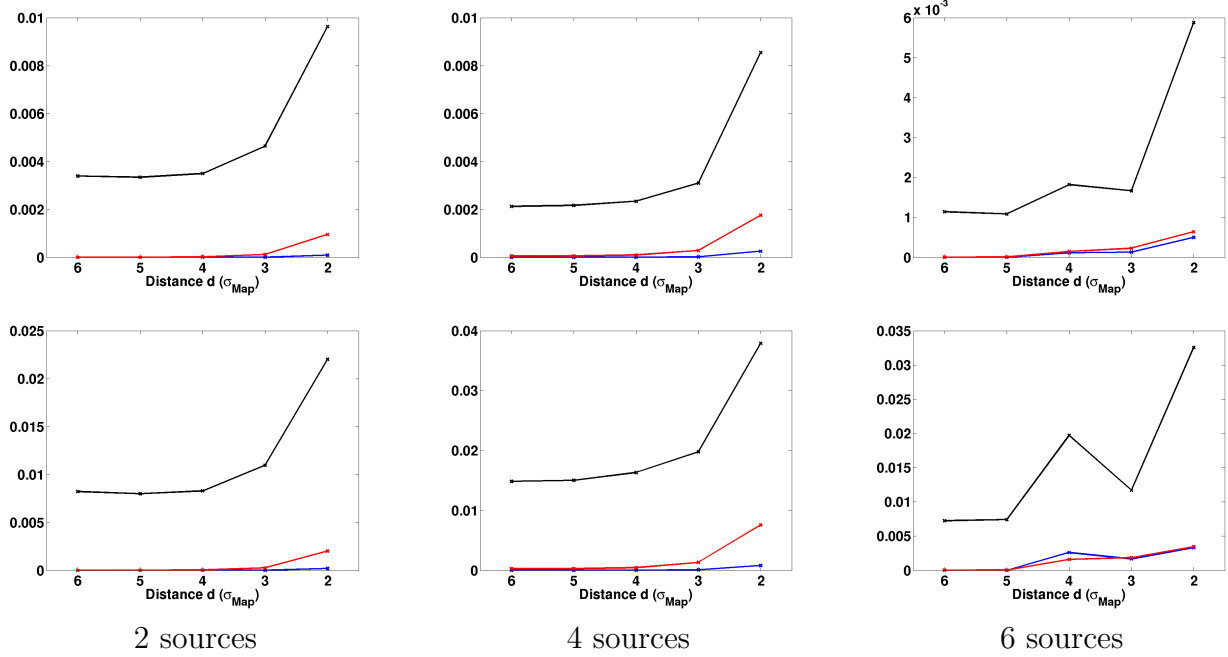


FIGURE 4.8 – Dispersion des solutions de la MASS-NMF-Map obtenues sur les 45 cubes synthétiques avec 100 réalisations de bruit. La ligne du haut illustre le $\text{NMCEB}^{\text{mean}}$ et la ligne du bas le $\text{NMCEB}^{\text{max}}$.

dispersion est en moyenne de 0,5 % pour attendre un maximum de 2 %. Dans le cas le moins favorable, elle atteint 1 % du maximum d'intensité pour atteindre 4 % au maximum.

Cas pratique Les résultats du cas pratique, pour les deux positions extrêmes, sont montrés sur la Figure 4.9 ainsi que dans le Tableau 4.3.

De nouveau, on remarque que les résultats obtenus ont les mêmes caractéristiques que ceux obtenus avec MASS seule. Dans le cas le plus favorable, les résultats sont excellents avec un SAM de 0,015 rad et un NRMSE de 2,07 %. On observe toujours une légère sous-estimation du pic d'intensité du spectre.

Dans le cas le moins parcimonieux, le spectre est asymétrique et on note la présence résiduelle d'une composante spectrale sur la droite de la raie. Ce résidu entraîne une sous-estimation du pic d'intensité ainsi qu'une erreur d'estimation de la position de ce pic. En revanche, on constate que le spectre obtenu est parfaitement lisse contrairement à celui estimé avec MASS seule. La source spatiale associée est correctement estimée et on notera l'absence de source résiduelle. Les performances sont améliorées par rapport à MASS utilisée seule avec un SAM de 0,027 rad et un NRMSE de 5,39 %.

Les barres d'erreur associées à la dispersion de MASS-NMF-Map sont, comme pour la précédente version hybride, quasiment négligeables. Dans le cas le plus parcimonieux, la dispersion maximale est de $3,94 \times 10^{-3}$ % pour atteindre 1,57 % dans le cas le moins parcimonieux.

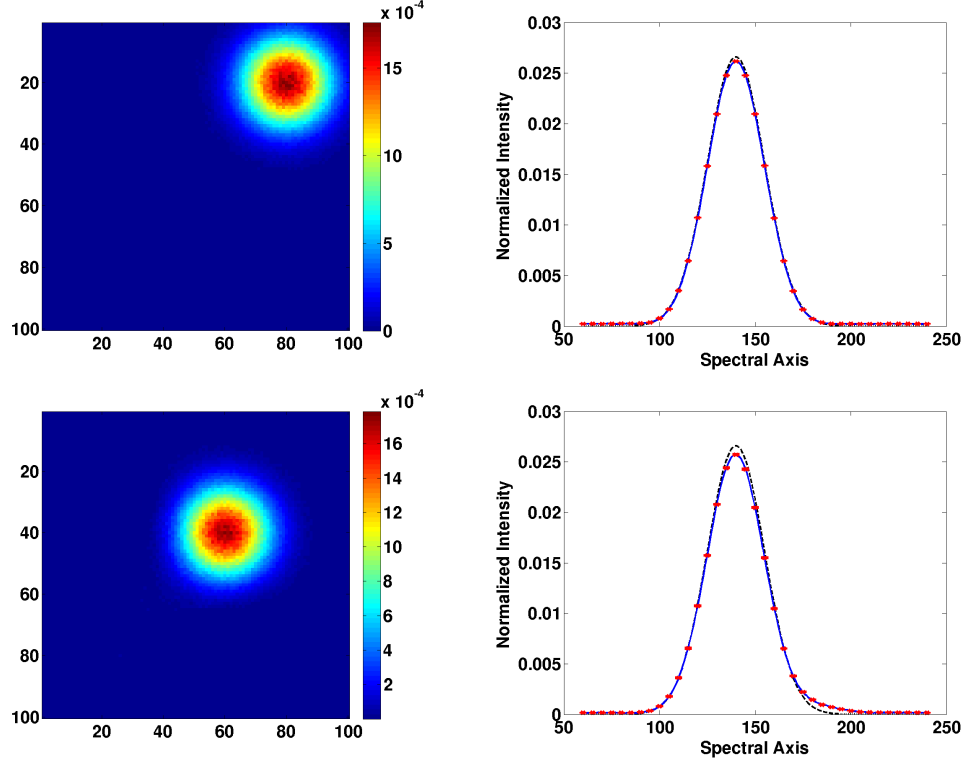


FIGURE 4.9 – Exemple de résultats obtenus par MASS-NMF-Map dans le cas le plus parcimonieux (ligne du haut) et le moins parcimonieux (ligne du bas). Le spectre estimé est en bleu et le spectre de référence est en tirets noirs. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

Bilan En résumé, cette seconde version hybride donne des résultats présentant les mêmes caractéristiques que ceux obtenus avec la méthode MASS. Globalement, les tendances des courbes de la Figure 4.7 sont identiques à celles de la Figure 4.2. De nouveau, on souligne une nette amélioration des performances pour les mélanges contenant 10 dB de bruit en comparaison avec la méthode MASS utilisée seule, ainsi qu’une nette amélioration de la dispersion des solutions par rapport à celle obtenue avec la méthode MC-NMF seule (Figure 3.9).

Dans la section suivante, nous comparons les méthodes MC-NMF, MASS, MASS-NMF-Spec et MASS-NMF-Map dans le but d’évaluer les apports des versions hybrides. Nous comparons également les performances des méthodes hybrides construites à partir de SpaceCORR étudiées dans le chapitre précédent à celles construites à partir de MASS étudiées dans ce chapitre.

4.4.4 Comparaisons et discussion des résultats

Nous nous basons de nouveau sur le cas pratique utilisé jusqu’ici, à savoir le cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB. Les critères de performances récapitulés dans le tableau 4.4 sont moyennés suivant les 4 sources. Nous étudions les deux cas de parcimonie extrêmes :

	$d = 6\sigma_{Map}$	$d = 2\sigma_{Map}$
NRMSE ₂	2,07 %	5,39 %
SAM ₂ (rad)	0,015	0,027
NMCEB _{$\ell=2$} ^{mean}	1,54e-3 %	0,21 %
NMCEB _{$\ell=2$} ^{max}	3,94e-3 %	1,57 %

TABLE 4.3 – Mesures de performances associées aux résultats obtenus par MASS-NMF-Map sur le cas pratique (2^{ième} source du cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB).

$d = 6$ et $d = 2$.

		MC-NMF	MASS	MASS-NMF-Spec	MASS-NMF-Map
$d = 6\sigma_{Map}$	NRMSE	15,34 %	3,08 %	16,56 %	2,58 %
	SAM (rad)	0,074	0,020	0,089	0,015
	NMCEB ^{mean}	2,67 %	-	0,15 %	9,46e-4 %
	NMCEB ^{max}	13,94 %	-	0,70 %	3,94e-3 %
$d = 2\sigma_{Map}$	NRMSE	18,30 %	10,0 %	12,72 %	7,41 %
	SAM (rad)	0,082	0,068	0,056	0,048
	NMCEB ^{mean}	3,68 %	-	0,38 %	0,12 %
	NMCEB ^{max}	23,32 %	-	1,47 %	0,57 %

TABLE 4.4 – Mesures de performances obtenus par les différentes méthodes pour un cube contenant 4 sources avec un SNR de 20 dB. Les résultats en gras identifient les cas où les méthodes hybrides améliorent les résultats obtenus par les méthodes seules. Les résultats soulignés identifient les meilleurs résultats obtenus pour chacun des deux cubes.

4.4.4.1 Apports de MASS-NMF-Spec

Le cas le plus parcimonieux ($d = 6$) donne des résultats ayant les mêmes tendances que ceux obtenus avec la version hybride SCA-NMF-Spec (voir Section 3.3.4.1).

La méthode MASS utilisée seule donne des résultats excellents puisqu'elle est utilisée dans des conditions favorables de parcimonie. La version hybride MASS-NMF-Spec donne en revanche des résultats contre intuitifs. Les performances sont en deçà de celles obtenues par les méthodes seules.

Les spectres utilisés pour initialiser la MC-NMF sont très proches des vrais spectres élémentaires contenus dans les observations. Cependant la MC-NMF dégrade systématiquement ces spectres ainsi que les cartes d'abondance associées. La qualité de l'estimation est au final proche de celle obtenue avec la MC-NMF seule. On note cependant que la dispersion des solutions de cette première version hybride est nettement améliorée par rapport à celle observée avec la MC-NMF seule.

Les résultats obtenus dans le cas le moins parcimonieux sont mitigés. Dans ce contexte, l'estimation de MASS reste correcte dans les cas les plus favorables de bruit (20 ou 30 dB). Ainsi, utiliser les spectres correctement estimés, au bruit résiduel près, permet à la MC-NMF

de lisser le résultat final sans gommer les artefacts résiduels restant. On note alors dans ce cas une légère progression du SAM, sans amélioration significative de l'estimation de MASS. En comparaison à la MC-NMF employée seule, on note une nette progression des performances en plus d'une réduction significative de la dispersion des solutions. De plus, on mentionne que dans le cas des mélanges contenant 10 dB de bruit (absent du tableau), les performances de cette première version hybride sont nettement meilleures que celle obtenues avec les méthodes seules.

En conclusion, on constate dans tous les cas une réduction conséquente de la dispersion des solutions de MASS-NMF-Spec. L'initialisation avec les spectres estimés avec MASS rend la MC-NMF très stable.

Mis à part le cas des données fortement bruitées, les performances atteintes par MASS sont tout à fait correctes même dans le cas le moins parcimonieux. Ainsi l'initialisation de la MC-NMF avec les spectres issus de MASS ne permet pas d'améliorer significativement les résultats. Cette situation est similaire à celle déjà évoquée sur l'apport des méthodes hybrides dans le chapitre précédent. Si la MC-NMF est initialisée avec des résultats corrects en terme de qualité, il est souhaitable de contraindre un grand nombre de coefficients, et donc de procéder à une initialisation par les cartes d'abondance et non par les spectres.

Dans le cas de données fortement bruitées, la méthode MASS donne des résultats mitigés. Les spectres obtenus sont correctement démêlés mais sont toujours perturbés par du bruit. Ainsi, l'initialisation de la MC-NMF par les spectres dans cette situation permet une amélioration des critères de performances. Le principal effet de la MC-NMF est un lissage des résultats.

4.4.4.2 Apports de MASS-NMF-Map

Globalement, on constate que les performances de cette seconde version hybride sont systématiquement meilleures que celles obtenues par les méthodes utilisées séparément.

Ainsi, dans l'exemple présenté dans le tableau ci-dessus, on observe que la solution donnée par MASS est améliorée (même dans le cas le plus parcimonieux où celle-ci est déjà excellente). La dispersion des solutions de MASS-NMF-Map est négligeable dans le cas le plus parcimonieux avec un maximum de $3,94 \times 10^{-3}$ % du maximum d'intensité. Dans le cas le moins parcimonieux, elle reste faible avec un maximum de 0.57 % dans l'exemple considéré.

De plus, on constate sur l'ensemble des tests que les performances de MASS-NMF-Map sont systématiquement meilleures que celles obtenues avec MASS-NMF-Spec, quel que soit le degré de parcimonie (de $d = 6$ à $d = 2$) ou le niveau de bruit. Cependant, ce constat est à nuancer. Les performances de la méthode MASS utilisée seule sont correctes (si l'on excepte le cas des mélanges à 10 dB). Or dans le chapitre précédent, nous avons conclu dans la Section 3.3.4.3 que si les résultats de SpaceCORR étaient bons, l'initialisation de la MC-NMF par les cartes (*i.e.* contraindre un grand nombre de coefficients à l'initialisation) donne les meilleures performances. En revanche, si SpaceCORR ne fournit qu'une approximation grossière des composantes du mélange, il est préférable de laisser davantage de liberté à la MC-NMF est donc d'initialiser par les spectres.

Dans les tests effectués jusqu'ici, MASS donne des résultats satisfaisant pour des distances allant de $d = 6$ à $d = 2$. Ainsi, dans tous les cas évoqués jusqu'ici, l'initialisation par les cartes

(MASS-NMF-Map) donne les meilleures performances. En revanche, si l'on réduit davantage le degré de parcimonie dans les données (cas non illustré), on constate que pour une distance de $d = 1$, la version MASS-NMF-Spec donne de meilleurs résultats.

En conclusion, on constate que MASS-NMF-Map permet de réduire considérablement la dispersion des solutions données par la MC-NMF utilisée seule, les résultats obtenus étant quasiment uniques. Les performances de cette version hybride sont systématiquement meilleures que celles obtenues par les méthodes utilisées séparément, même dans le cas où MASS est utilisée dans des conditions favorables.

4.4.4.3 Comparaison MASS / SpaceCORR

Dans ce chapitre et le précédent, nous avons identifié les situations les plus favorables à chaque version hybride des méthodes SpaceCORR et MASS. Nous comparons ici l'ensemble des méthodes hybrides.

Dans des conditions favorables de parcimonie ($d = 6$ à $d = 3$), SpaceCORR et MASS utilisées seules donnent des résultats très proches pour les mélanges avec un SNR de 30 et 20 dB (régulièrement MASS et légèrement meilleure pour les mélanges à 30 dB). En revanche, SpaceCORR est beaucoup plus robuste au niveau de bruit élevé (10 dB). Dans les conditions limites de parcimonie ($d = 2$), MASS donne globalement de meilleurs résultats. Cet avantage pour MASS s'explique ici par le fait que le critère de parcimonie $d = 2$ est plus restrictif pour SpaceCORR que pour MASS. En effet, pour $d = 2$, il reste très peu de zones mono-sources dans les données alors que le nombre de pixels purs reste conséquent.

Concernant les méthodes hybrides utilisant l'initialisation par les spectres (SCA-NMF-Spec et MASS-NMF-Spec), on retrouve globalement les mêmes conclusions qu'avec les méthodes utilisées seules. En effet, les performances sont identiques dans des conditions favorables de parcimonie avec un SNR de 30 ou 20 dB. Ce résultat est cohérent puisque les méthodes SpaceCORR et MASS fournissent une bonne estimation des spectres élémentaires dans ce cas. Dans le cas des mélanges à 10 dB de bruit, SpaceCORR étant plus robuste au bruit, la version SCA-NMF-Spec donne les meilleures performances. Et inversement, dans le cas le moins parcimonieux ($d = 2$), c'est la méthode MASS-NMF-Spec qui donne les meilleurs résultats.

Concernant les méthodes hybrides utilisant l'initialisation par les cartes (SCA-NMF-Map et MASS-NMF-Map), on retrouve de nouveau les mêmes conclusions dans des conditions favorables de parcimonie et de bruit. Dans ce cas, les deux versions hybrides donnent des résultats équivalents. A contrario, dans des conditions limites de parcimonie, MASS donne les meilleures performances. Dans le cas de données fortement bruitées, SpaceCORR donne systématiquement les meilleurs résultats.

4.4.4.4 Conclusion des tests synthétiques

Tout d'abord, les deux méthodes hybrides présentées dans ce chapitre améliorent nettement la dispersion des solutions données par la MC-NMF utilisée seule. Ce point constitue

le premier intérêt à utiliser les méthodes hybrides.

En ce qui concerne la qualité de décomposition atteinte par les méthodes hybrides, les tests sur données synthétiques montrent que, selon le taux de parcimonie conjointe des sources, il est préférable d'utiliser l'une ou l'autre des deux versions hybrides. En effet, les conclusions précédemment évoquées sont les mêmes que celles obtenues avec les version hybrides de la méthode SpaceCORR.

Dans les conditions favorables de parcimonie, *i.e.* si les résultats donnés par la méthode MASS sont bons et ne constituent pas une approximation, la méthode MASS-NMF-Map est à privilégier. Dans ce cas, contraindre un grand nombre de paramètres lors de l'initialisation de la NMF permet d'affiner davantage les estimations de MASS, alors que la version MASS-NMF-Spec dégrade les résultats de MASS.

A contrario, si les résultats donnés par MASS sont approximatifs, la méthode MASS-NMF-Map donne les meilleurs résultats. On rappelle que dans l'ensemble de nos tests synthétiques illustrés dans le chapitre, ce cas de figure ne s'est jamais présenté. En effet même pour $d = 2$, les performances de MASS sont correctes est donc une forte contrainte sur l'initialisation de la MC-NMF reste la meilleure solution. En revanche, lors de nos tests complémentaires avec $d = 1$, la version MASS-NMF-Spec donne de meilleures performances. Dans ces conditions, les résultats de MASS ne sont qu'une approximation grossière des composantes élémentaires, il est donc nécessaire de contraindre un minimum de coefficients dans l'initialisation de la MC-NMF.

Le dernier point discuté dans ces tests est le choix de la méthode pour initialiser la MC-NMF, *i.e.* quand utiliser SpaceCORR et quand utiliser MASS. Pour résumer, SpaceCORR et ces versions hybrides sont à privilégier pour les mélanges où l'hypothèse de présence de zones mono-sources est garantie, même avec un SNR faible. Dans les autres cas, MASS et ses versions hybrides donnent des performances meilleures, ou au moins équivalentes.

Dans la section suivante, nous présentons une application de MASS et de ses versions hybrides sur données réelles.

4.5 Résultats expérimentaux sur données réelles

L'idée générale derrière la construction de la méthode MASS est de relâcher la contrainte de parcimonie nécessaire à SpaceCORR, *i.e.* de réduire la dimension des zones spatiales d'analyse à un seul pixel. Cette nécessité est apparue lors de l'étude des données de NGC7023-NW cartographiées par HIFI-Herschel (voir Section 2.6, et plus particulièrement la Figure 2.10 (b) présentant ces données). En effet, ces données ne contiennent pas de zones mono-sources pour chaque source, ce qui rend SpaceCORR inutilisable. De plus les solutions données par MC-NMF utilisée seule, sont sensibles à l'initialisation comme en témoignent les barres d'erreur présentes sur la Figure 4.11. L'utilisation d'une méthode hybride est donc nécessaire pour améliorer ces résultats.

Les données HIFI-Herschel pour NGC7023-NW contiennent 6 sources spatiales. Ce nombre est estimé par la méthode présentée dans la Section 1.3.1. La courbe des valeurs propres de

la matrice de covariance spatiale des données est montrée sur la Figure 4.10. L'estimation du nombre de sources est possible pour ces données. En effet, la courbe des valeurs propres ordonnées est explicitement constituée de deux parties séparées à l'indice 7. Avant cette frontière, les valeurs propres sont régulièrement décroissantes puis elles forment un plateau après cette frontière.

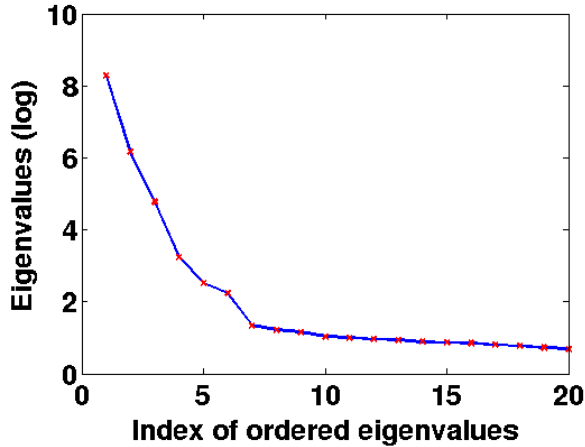


FIGURE 4.10 – Courbe des 20 premières valeurs propres de la matrice de covariance spatiale des données de NGC7023-NW.

Sur l'ensemble des figures montrant les résultats obtenus, la ligne en pointillés indique la vitesse systémique de la nébuleuse (3.06 km/s). Arbitrairement, on choisit d'ordonner les composantes suivant un ordre croissant de décalage en vitesse. Les composantes sont nommées de S1 à S6.

4.5.1 MC-NMF

Nous présentons sur la Figure 4.11, les résultats de la décomposition donnée par la MC-NMF pour la nébuleuse NGC7023-NW. On précise qu'il s'agit de la version de l'algorithme avec normalisation à chaque itération présentée dans la Section 3.2.2.

Avant toute chose, on constate que la dispersion des solutions de la MC-NMF est conséquente pour chaque spectre élémentaire estimé, malgré la normalisation à chaque itération de la NMF. De plus, la qualité de l'estimation des raies d'émission varie d'une composante à l'autre :

- Les composantes S2, S3 et S4 ont un profil pseudo gaussien, symétrique et ne sont pas perturbées par le résidu d'autres raies.
- La composante S5 n'est plus symétrique, on devine la présence d'une (ou plusieurs) composante résiduelle sur l'aile gauche de la raie.
- Les composantes S1 et S6 contiennent à l'évidence le résidu d'au moins une autre raie d'émission. Au regard de la position du second lobe visible sur les spectres estimés, la composante S1 contient un résidu de S5 tandis que S6 contient un résidu de S1.

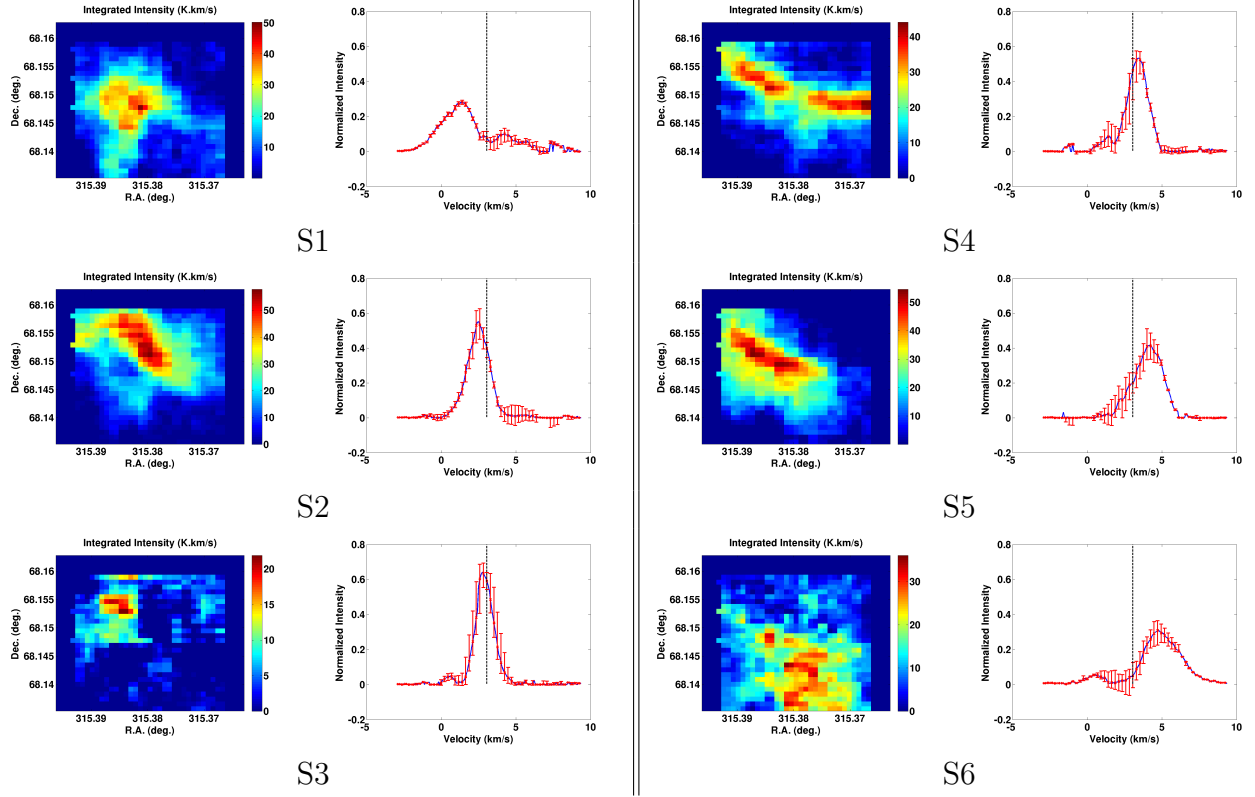


FIGURE 4.11 – Cartes d’abondance et spectres obtenus par l’application de la MC-NMF aux données de NGC7023-NW. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

Concernant les sources spatiales, on observe qu’elles sont recouvrantes, contrairement au cas de la Tête de Cheval. Cependant, pour les composantes S2, S4, S5 et S6, on peut supposer la présence de pixels purs dans les données. En effet, certaines parties de ces sources semblent ne contenir qu’une unique composante. On peut donc formuler l’hypothèse de la présence de pixels purs pour ces composantes. Cette hypothèse est à mettre en relation avec le fait que les composantes estimées avec la MC-NMF peuvent toujours contenir des contributions d’autres sources (notamment les composantes S1 et S6). Par ailleurs, les composantes S1 et S3 semblent systématiquement recouvrantes, il n’y a probablement pas de pixel pur dans les données pour ces sources, MASS n’en fournira au mieux qu’une approximation.

4.5.2 MASS

La Figure 4.12 montre les résultats obtenus avec MASS sur la nébuleuse NGC7023-NW.

On peut remarquer deux différences majeures avec les résultats de la MC-NMF. Globalement, les raies estimées sont plus larges que celles obtenues par la MC-NMF. En effet, on observe que le pic d’intensité des raies estimées est inférieur dans les estimations obtenues avec MASS, cette diminution de l’intensité étant dû à la normalisation des raies. Mis à part les composantes S2 et S3, les raies estimées semblent contenir les contributions d’autres composantes élémentaires, ce qui entraîne l’élargissement des raies. Par ailleurs, on constate que

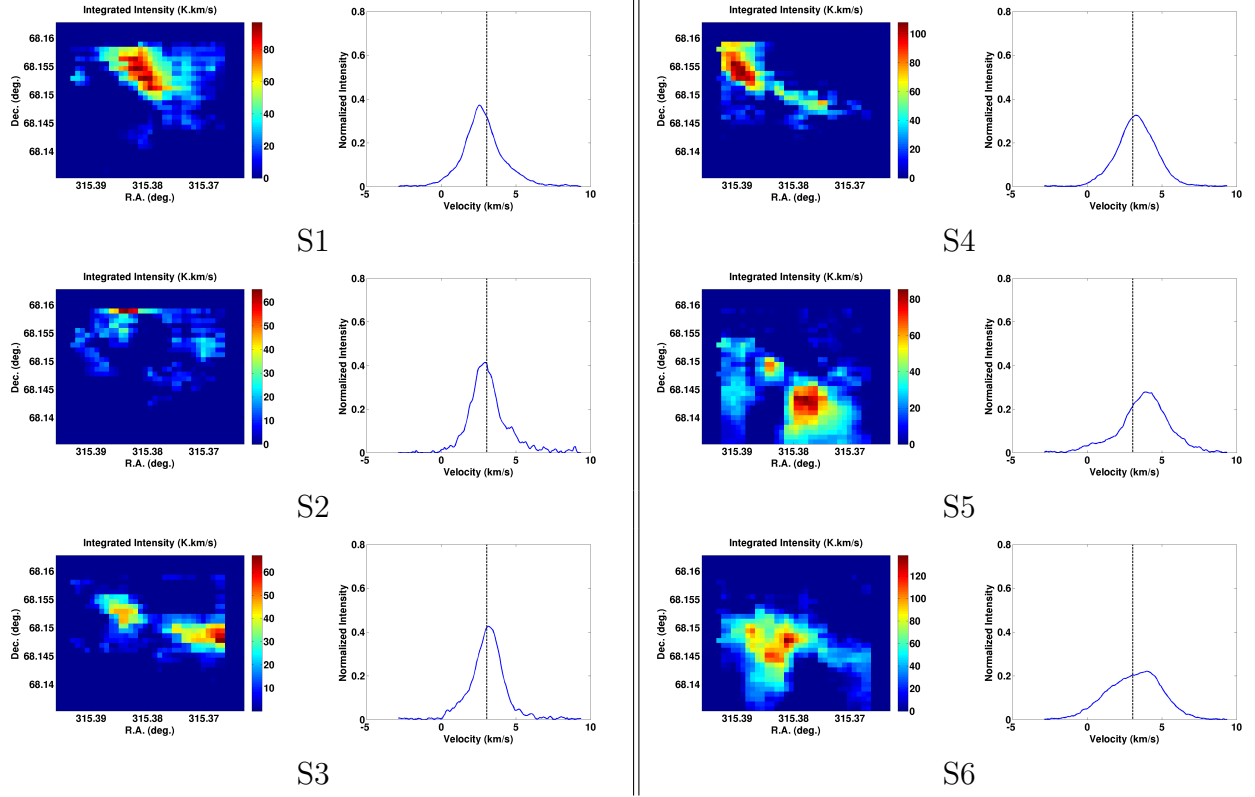


FIGURE 4.12 – Cartes d’abondance et spectres obtenus par l’application de MASS aux données de NGC7023-NW.

la composante spectrale S1 obtenue avec la MC-NMF est absente des estimations obtenues par MASS. Les deux composantes S2 et S3 ont leurs pics d’intensité positionnés à la même vitesse. Par comparaison, on remarque qu’il s’agit de la composante S4 de la MC-NMF séparée en deux composantes. Cette séparation est bien visible sur les cartes d’abondance.

Les sources spatiales estimées sont disjointes contrairement aux résultats obtenus avec la MC-NMF pour lesquels on observe du recouvrement. Si on associe les cartes d’abondance de MASS et de la MC-NMF, on observe que la source S1 estimée avec MASS est une partie de la source S2 estimée avec la MC-NMF. De même, les sources S2, S3, S4 et S5 estimées avec MASS sont respectivement des parties des sources S3, S4, S5 et S6 estimées avec la MC-NMF.

Le cas de la source S6 estimée avec MASS est intéressant. En effet, cette source spatiale correspond à la source S1 estimée avec la MC-NMF. Cependant on remarque que les spectres associés ne correspondent pas. Le spectre de la composante S6 de MASS est plus proche (au sens de la position du pic d’intensité) de la composante S6 de la MC-NMF.

Pour conclure sur les résultats obtenus avec MASS, l’utilisation de la méthode seule n’est pas pertinent. Les raies d’émission estimées contiennent probablement les contributions d’autres composantes et l’extraction des sources spatiales n’est que partielle pour chaque composante. Cependant, ces premiers résultats fournissent une première approximation grossière des composantes élémentaires, que nous utilisons pour initialiser la MC-NMF.

4.5.3 Méthodes hybrides

La Figure 3.22 montre les résultats obtenus avec la méthode MASS-NMF-Spec et la Figure 3.23 montre ceux obtenus par MASS-NMF-Map.

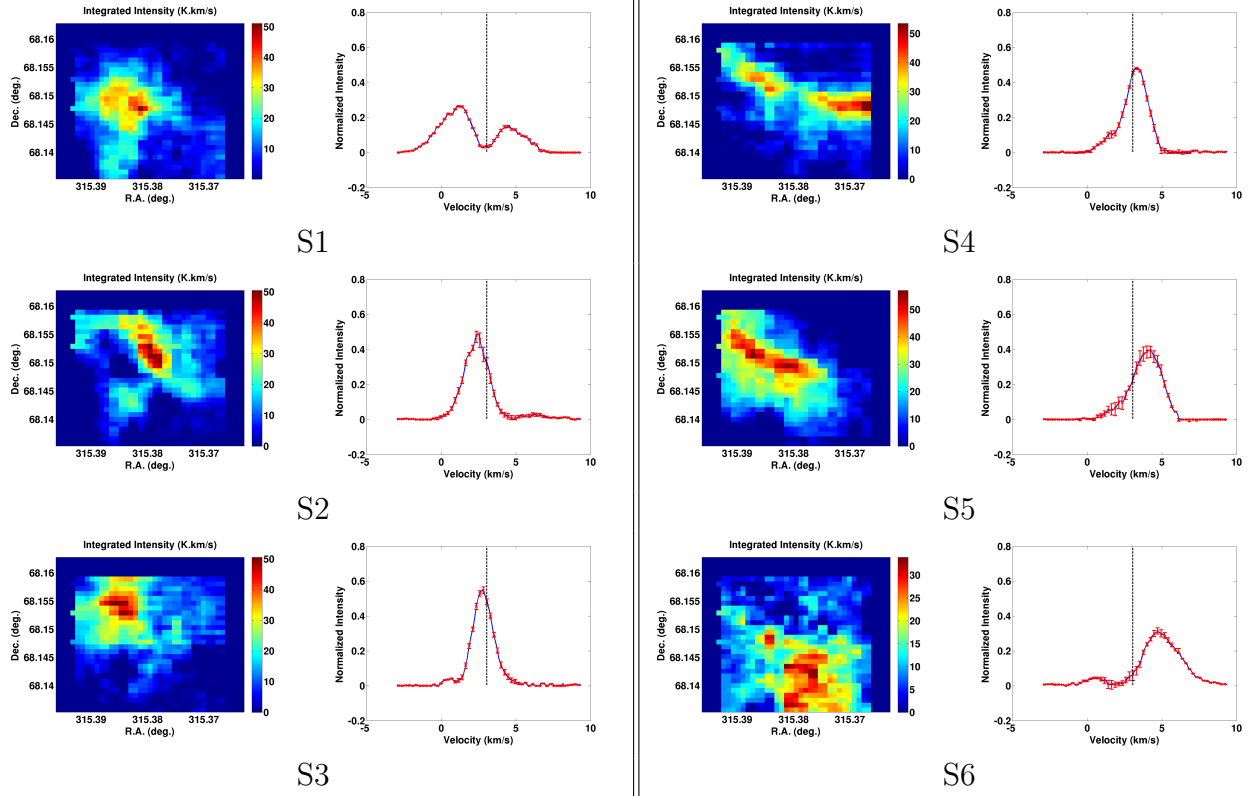


FIGURE 4.13 – Cartes d’abondance et spectres obtenus par l’application de MASS-NMF-Spec aux données de NGC7023-NW. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

De nouveau, on constate que les méthodes donnent les mêmes tendances que celles observées lors des tests sur données synthétiques ainsi que dans l’application sur données réelles du chapitre précédent. Les résultats obtenus par la méthode MASS-NMF-Spec sont visuellement proches de ceux obtenus par la MC-NMF. Ceux de MASS-NMF-Map sont proches des résultats obtenus par MASS.

Concernant la méthode MASS-NMF-Spec, on note deux différences avec les résultats de la MC-NMF. Le second lobe présent dans l’estimation de la raie de la composante S1 est plus accentué dans cette version hybride. On souligne que la carte d’abondance associée est visuellement la même. On observe également que la version hybride a gommé quelques artefacts de bruit présents au coté des raies estimées S3 à S5 avec la MC-NMF.

Les résultats obtenus avec MASS-NMF-Map sont très proches de ceux obtenus avec MASS seule. Or, nous avons conclu que MASS seule ne donne pas pour ces données de résultats satisfaisants. Cette version hybride n’améliore donc pas l’approximation effectuée par MASS.

Concernant les barres d’erreur associées à la dispersion des solutions, on constate qu’elles sont quasiment négligeables pour la version hybride MASS-NMF-Map. En revanche, on ob-

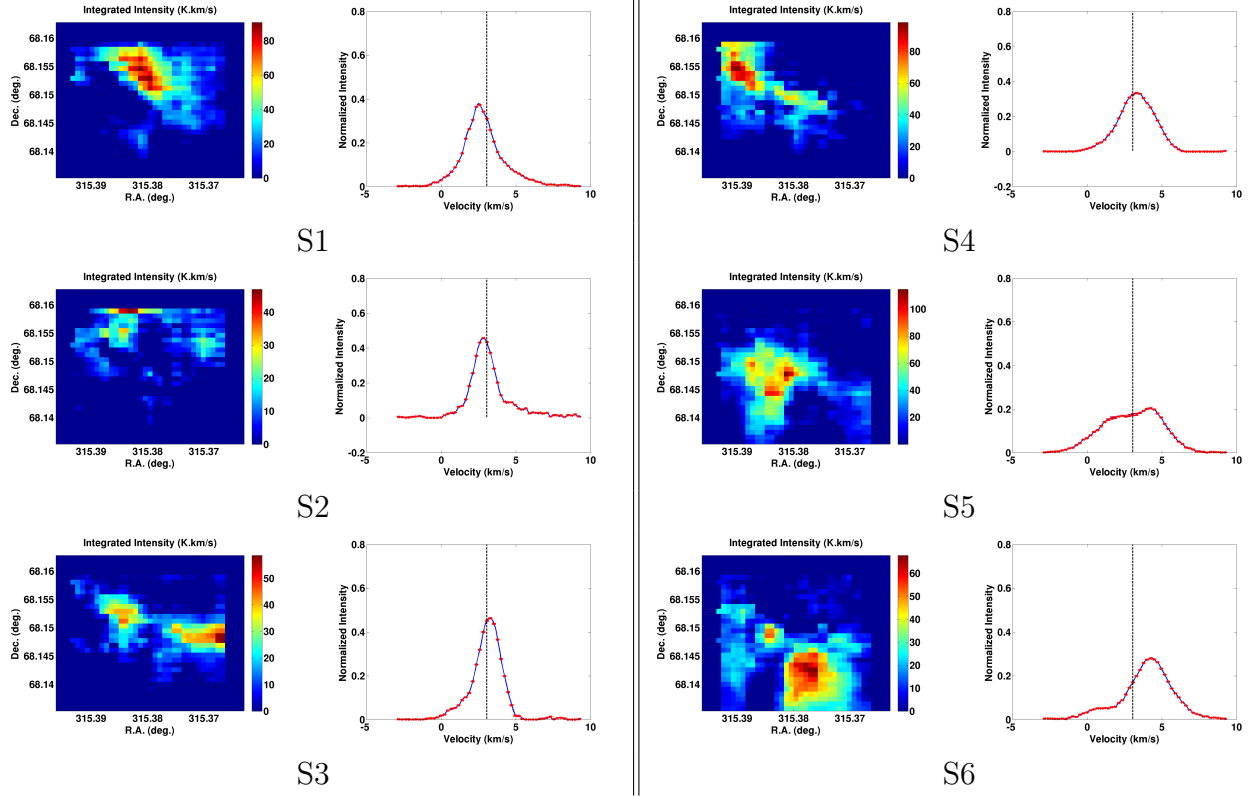


FIGURE 4.14 – Cartes d’abondance et spectres obtenus par l’application de MASS-NMF-Map aux données de NGC7023-NW. Les barres d’erreur rouges donnent la dispersion des solutions.

serve une variabilité des solutions dans les résultats de MASS-NMF-Spec. Les solutions sont nettement moins dispersées qu’avec la MC-NMF utilisée seule (voir tableau), mais la variabilité reste présente malgré la contrainte imposée à l’initialisation de la MC-NMF. Dans le paragraphe suivant, nous concluons sur les résultats des méthodes hybrides pour ce cas réel.

4.5.4 Bilan pour les données réelles

Afin de conclure sur l’application des méthodes hybrides sur les données HIFI-Herschel de la nébuleuse NGC7023-NW, nous représentons l’ensemble des composantes spectrales estimées sur la Figure 4.15.

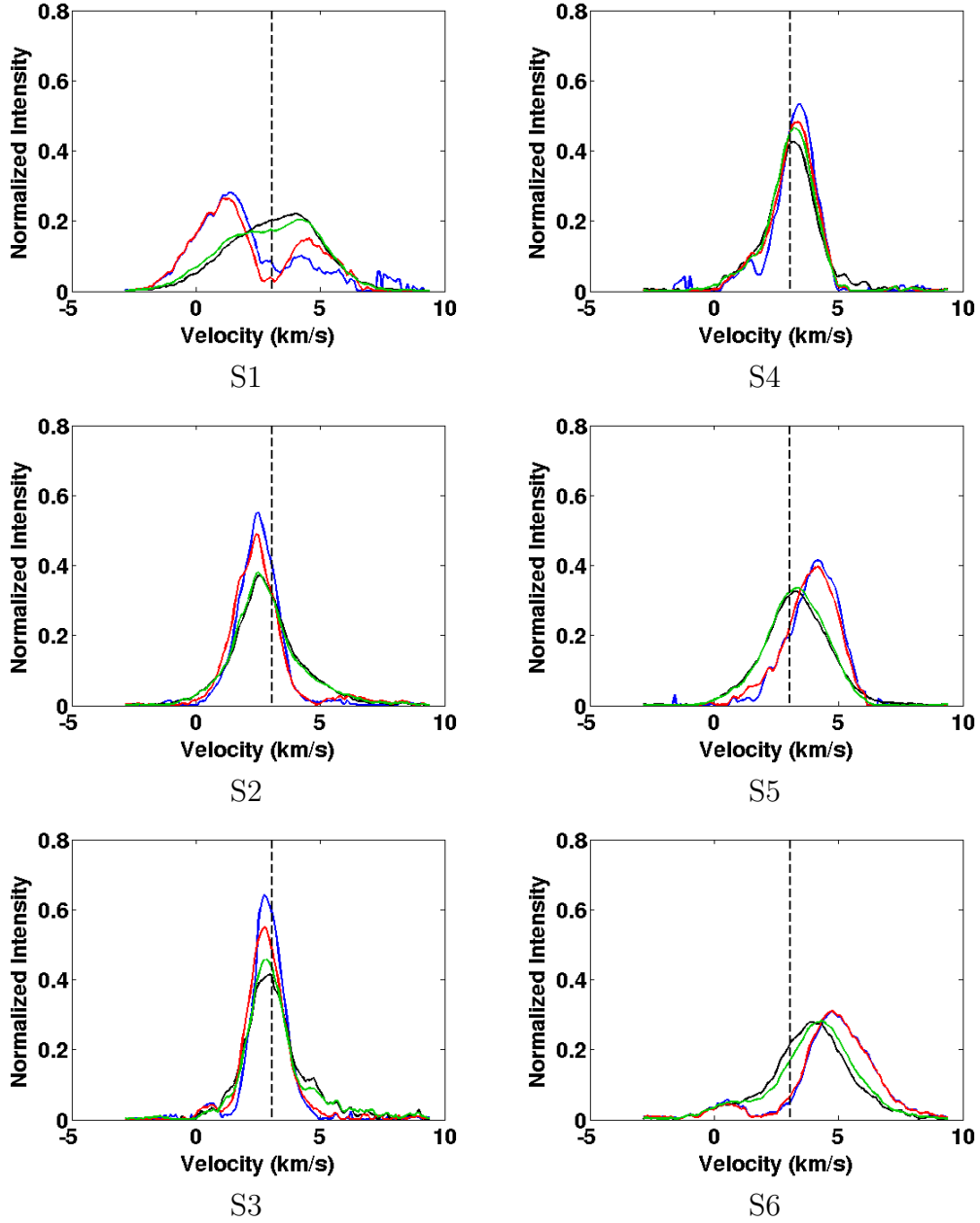


FIGURE 4.15 – Représentation de l'ensemble des raies d'émission de NGC7023-NW. Les spectres bleus sont obtenus par la MC-NMF, les noirs par MASS, les rouges par MASS-NMF-Spec et les verts par MASS-NMF-Map.

Tout au long de ce chapitre et du précédent, nous avons souligné la proximité des estimations des méthodes hybrides avec les méthodes seules. En effet, les composantes spectrales issues de la méthode MASS-NMF-Spec sont proches de celles obtenues par la MC-NMF et a contrario, celles de MASS-NMF-Map sont proches de celles obtenues par MASS. Ces conclusions sur les méthodes hybrides se retrouvent dans les résultats obtenus sur NGC7023-NW illustrés sur la Figure 4.15.

De plus, on constate que les versions hybrides issues de MASS se comportent comme les méthodes hybrides issues de SpaceCORR. Lors des tests synthétiques, la MC-NMF avait tendance à sur estimer le pic d'intensité, aux prix d'une diminution de la largeur de la raie, et a contrario, MASS et SpaceCORR avaient tendance à sous estimer le pic accompagnée d'un élargissement de la raie. On constate de nouveau que les spectres estimés par les méthodes hybrides constituent des "versions intermédiaires" des spectres obtenus par les méthodes seules. La position du pic d'intensité des méthodes hybrides est située entre les deux positions obtenues par MC-NMF et par MASS.

Ainsi avec les données synthétiques, les méthodes seules fournissent un encadrement de la vraie solution, cet encadrement étant ensuite affiné par les méthodes hybrides. Cette tendance se retrouve sur les données réelles. On peut donc supposer que la vraie solution est comprise entre les estimations des deux méthodes hybrides.

Dans le cas précis de NGC7023-NW, nous avons conclu précédemment que la méthode MASS ne donnait qu'une approximation grossière de chaque composante. Les raies d'émission estimées contiennent le résidu d'autres raies. L'extraction des sources spatiales n'est que partielle pour chaque composante, et les raies S3 et S4 semblent être relatives au même spectre élémentaire (pics d'intensité situés à la même vitesse). Dans cette situation, nous avons établi, grâce aux tests synthétiques, que si MASS ne fournissait pas de résultats satisfaisants, à cause d'une hypothèse de parcimonie peu réaliste, il était souhaitable d'utiliser MASS-NMF-Spec.

Bien que nous ne disposions pas de vérité terrain pour favoriser les résultats d'une version hybride par rapport à l'autre, on peut tout de même supposer que la version de MASS-NMF-Spec fournit une estimation plus fiable des raies d'émission ainsi que de leurs cartes d'abondance associées.

	MC-NMF		MASS-NMF-Spec		MASS-NMF-Map	
	NMCEB ^{mean}	NMCEB ^{max}	NMCEB ^{mean}	NMCEB ^{max}	NMCEB ^{mean}	NMCEB ^{max}
S1	8,81 %	26,22 %	2,11 %	4,70 %	0,06 %	0,15 %
S2	17,32 %	68,42 %	3,91 %	18,39 %	0,13 %	0,47 %
S3	9,86 %	49,37 %	2,42 %	8,37 %	0,28 %	1,16 %
S4	9,23 %	52,44 %	5,25 %	15,46 %	0,15 %	0,36 %
S5	9,36 %	37,83 %	4,35 %	15,48 %	0,59 %	2,49 %
S6	11,25 %	37,53 %	3,90 %	14,21 %	0,17 %	0,57 %

TABLE 4.5 – Récapitulatif des mesures de dispersion des solutions de la MC-NMF pour les différentes méthodes.

On reporte les mesures de dispersion des méthodes dans le Tableau 4.5. On observe que les méthodes hybrides permettent une réduction significative de la dispersion des solutions de la MC-NMF. Cependant, contrairement aux tests synthétiques et au cas de la nébuleuse de la Tête de Cheval étudié dans le chapitre précédent, elles ne sont pas négligeables. La dispersion atteint un maximum de 18,39 % dans le cas de MASS-NMF-Spec. Elle est davantage réduite avec MASS-NMF-Map avec un maximum de 2,49 % du maximum d'intensité. Ce constat est dû à la contrainte imposée à la MC-NMF lors de l'initialisation (en terme de nombre de coefficients fixés).

Récemment, S. Foschino a, lors de son stage de Master 2 encadré par O. Berné, étudié la Nébuleuse NGC2023 cartographiée par IRS-Spitzer. L’objectif est l’étude de la répartition des différentes populations de poussière présentes dans le nuage de gaz (voir la Section présentant ce type de donnée pour la nébuleuse NGC7023-NW). Pour effectuer la séparation des 3 composantes élémentaires, l’auteur a dans un premier temps appliqué la méthode MC-NMF. Pour ces données, les solutions données par la méthode sont trop dispersées, la NMF étant dans ce cas trop sensible à une initialisation complètement aléatoire. Les résultats obtenus à la fin des 100 tirs Monte-Carlo ne sont pas cohérents.

L’auteur a donc dû utiliser la méthode MASS pour initialiser correctement la MC-NMF et ainsi obtenir des résultats exploitables. Au final, les barres d’erreur associées à la dispersion sont raisonnables. Les spectres estimés associés aux poussières présentes sont comparables à ceux obtenus dans l’étude d’autres nébuleuses.

Ainsi la méthode hybride MASS-NMF a été la seule alternative pour obtenir des résultats satisfaisants pour l’étude de ces données.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé une méthode de SAS géométrique. L’objectif visé lors de la construction de la méthode MASS était de réduire la dimension des zones d’analyse de la méthode SpaceCORR à un unique échantillon spatial. La méthode MASS nécessite des données non négatives et présentant des propriétés de parcimonie. Nous avons également proposé une hybridation de MASS et de la MC-NMF pour tirer parti des avantages des deux méthodes utilisées seules.

Nous avons ensuite effectué un ensemble de tests sur données synthétiques réalistes permettant d’évaluer les performances de ces méthodes et de définir les conditions d’application des deux versions hybrides proposées.

Pour finir nous avons utilisé nos méthodes sur les données réelles qui ont motivées cette contribution. La pertinence des résultats obtenus de notre côté d’une part, et par S. Foschino dans l’étude d’une autre nébuleuse d’autre part, nous permet de valider cette approche.

Dans le chapitre suivant, nous développons une autre approche permettant de relâcher les conditions de parcimonie imposées par SpaceCORR en permettant aux zones d’analyse de contenir plusieurs sources actives, au prix d’une contrainte de parcimonie supplémentaire.

Chapitre 5

Méthode de SAS basée sur l'intersection de sous-espaces

Sommaire

Introduction	146
5.1 Contexte géométrique	148
5.2 La méthode SIBIS	149
5.2.1 Identification des paires de zones IMS	150
5.2.1.1 Segmentation	150
5.2.1.2 Intersections mono-sources	151
5.2.2 Estimation de la matrice de mélange	151
5.2.3 Reconstruction des sources	152
5.3 Résultats expérimentaux	153
5.3.1 Tests sur données synthétiques	153
5.3.2 Test sur données réelles	155
Conclusion	155

Introduction

Dans le chapitre 3, nous avons étudié les performances de la méthode SpaceCORR ainsi que de ses versions hybrides utilisées sur des données hyperspectrales. L'efficacité de SpaceCORR et, dans une moindre mesure, des versions hybrides dépend de la qualité des zones mono-sources disponibles pour chaque source (voir Section 3.3.3.1). La présence de zones d'analyse mono-sources étant un facteur limitant de ces méthodes, nous avons proposé dans le chapitre précédent, une approche permettant de réduire la dimension des zones d'analyse à un seul échantillon spatial, relâchant ainsi la contrainte de parcimonie imposée par SpaceCORR.

Dans ce chapitre nous proposons une seconde variante à l'hypothèse de parcimonie conjointe des sources, la méthode SpaceCORR nécessitant la présence de zones mono-sources pour chaque source, la méthode MASS nécessitant quant à elle la présence de pixels mono-sources pour chaque source. L'idée générale que nous allons développer ici est d'utiliser de nouveau des zones d'analyses (de mêmes dimensions que celles de SpaceCORR) mais d'étudier l'interaction de deux zones à la place de les utiliser séparément. Ainsi, dans cette approche, nous ne nous intéressons pas directement au nombre de sources actives dans chaque zone mais au nombre de sources qu'une paire de zones a en commun. Plus spécifiquement, la méthode utilise les paires de zones partageant une unique source, cette contrainte étant moins restrictive que celle de SpaceCORR, en terme de nombre de sources actives par zone.

Une approche similaire a été étudiée par D. Benachir *et al.* [10] dans un contexte d'imagerie multispectrale ou hyperspectrale en observation de la Terre. La méthode est basée sur l'hypothèse qu'il existe au moins une zone bi-source pour chaque paire de sources possible. L'étude des propriétés géométriques de l'intersection de chaque paire de zone bi-sources partageant une unique source permet d'estimer les coefficients d'abondance relatifs à cette source. Cependant les propriétés géométriques des données sont induites par la somme à 1 des coefficients d'abondance, rendant ainsi cette méthode inutilisable sur nos données.

L'approche que nous proposons est basée sur le même concept d'étude des intersections de paires de zones pour estimer les paramètres du mélange. Cependant, pour nos besoins, nous éliminons la propriété de somme à 1 des coefficients d'abondance, l'intersection de chaque paire n'est donc pas de même nature, et nécessite donc une méthode différente d'identification et d'exploitation.

Nous rappelons ci-après les notions de parcimonie évoquées tout au long de ce manuscrit. Suivant les méthodes considérées, le terme parcimonie ne désigne pas la même information. Nous pouvons identifier trois concepts distincts :

- Dans le sens conventionnel, un signal est parcimonieux si un grand nombre de ses échantillons sont nuls ou négligeables.
- Dans le contexte des méthodes SpaceCORR, MASS et BiSCorr, la parcimonie décrit une information conjointe (voir Section 1.4.3). Les signaux sources considérés sont conjointement parcimonieux dans une zone du domaine d'analyse si pour tous les signaux observés, la plupart des signaux sources sont simultanément inactifs dans ces zones (*i.e.* ils n'interviennent pas dans les mélanges observés). Une unique source est

active par zone parcimonieuse dans le cas des méthodes SpaceCORR et MASS, deux sont actives par zone pour la méthode BiSCorr.

- Un troisième concept peut être introduit à partir de BiSCorr et sera étendu dans ce chapitre. En plus des définitions précédentes, la parcimonie signifie ici qu’une paire de zones d’analyse a une unique source en commun, toutes les autres sont spécifiques à chacune des deux zones.

Pour résumer, le premier concept se rapporte au nombre d’échantillons nuls dans un seul signal, le second au nombre de signaux sources simultanément inactifs dans une seule zone et le dernier au nombre de sources partagées par une paire de zones d’analyse. La méthode que nous proposons est basée sur cette dernière notion.

Contrairement à la méthode BiSCorr, notre approche ne requiert pas un nombre fixe de sources présentes dans chaque zone d’une paire pour exploiter la parcimonie. L’unique contrainte pour une telle paire de zones est que ces deux zones partagent une unique source. Cependant, nous pouvons définir une condition nécessaire mais non suffisante sur le nombre de sources présentes dans chaque zone d’une paire. Supposons que la première zone d’une paire contient $\ell_1 \in [2, L - 1]$ sources (les cas $\ell_1 = 1$ et $\ell_1 = L$ sont exclus car ils se réfèrent aux méthodes basées sur la présence de zones mono-sources et nous considérons ici le cas plus difficile où les données ne contiennent pas de telle zone). Le nombre de sources ℓ_2 de la seconde zone sera alors dans l’intervalle $\ell_2 \in [2, L - \ell_1 + 1]$.

A partir de ces observations, nous introduisons les définitions et hypothèse suivantes :

Définition 5 : Une paire de zones partageant une unique source est qualifiée de paire a “intersection-mono-source”, abrégée en “paire IMS” par la suite.

Définition 6 : Une source est dite “accessible” dans un domaine de représentation s’il existe au moins une paire IMS partageant cette source.

Hypothèse 9 : Chaque source est accessible, au sens de la *Définition 6*, dans le domaine de représentation considéré.

Ce chapitre présente une méthode géométrique, appelé SIBIS (pour *Subspace-Intersection Blind Identification and Separation* en anglais), pour résoudre le problème de SAS avec un modèle linéaire instantané. SIBIS est basée sur la recherche de paires de sous-espaces dont les intersections contiennent un unique signal source. Les coefficients de mélange sont identifiés à partir de ces intersections, puis les sources sont reconstruites par moindres carrés. SIBIS requiert l’indépendance linéaire des sources et pour chaque source, il doit exister au moins une paire de sous-espaces partageant uniquement cette source.

Dans les sections suivantes, nous décrirons tout d’abord le cadre géométrique de la méthode a travers l’étude d’un exemple simple. Ensuite nous détaillerons chaque étape de l’algorithme de SIBIS. Pour finir, nous évaluerons les performances de SIBIS sur données synthétiques et nous l’appliquerons sur données réelles.

5.1 Contexte géométrique

La méthode SIBIS étant basée sur les propriétés géométriques des données, nous utilisons la même formulation du problème de SAS que celle employée avec MASS (Eq. 4.1)). Chaque spectre observé est représenté comme un élément d'un \mathbb{R}^N espace vectoriel. Le modèle de mélange en considérant des sources spatiales s'écrit :

$$x_m(n) = \sum_{\ell=1}^L a_{\ell}(n) s_{\ell m} \quad \forall n \in \{1, \dots, N\}, \quad (5.1)$$

où x_m est la $m^{\text{ième}}$ colonne de X (*i.e.* le $m^{\text{ième}}$ spectre observé), a_{ℓ} la $\ell^{\text{ième}}$ colonne de A (*i.e.* le $\ell^{\text{ième}}$ spectre élémentaire) et $s_{\ell m}$ et le coefficient d'abondance associé. Pour la partie théorique de ce chapitre, nous emploierons plutôt le vocabulaire de la géométrie, *i.e.* nous appellerons vecteurs les différentes composantes spectrales.

Nous étudions dans un premier temps le cas simple d'un mélange de $L = 3$ sources et nous supposons que l'*Hypothèse 9* est satisfaite. On note Z_1 et Z_2 deux zones spatiales d'analyse, $Z_1 = \{1, 2\}$ et $Z_2 = \{3, 4\}$ sont réduites à deux échantillons dans cet exemple. Z_1 et Z_2 contiennent respectivement les vecteurs observés $X(Z_1) = [x_1 \ x_2]$ et $X(Z_2) = [x_3 \ x_4]$. Les vecteurs observés dans Z_1 sont les mélanges des sources d'indices $\ell = \{1, 2\}$ et ceux dans Z_2 sont les mélanges des sources d'indices $\ell = \{2, 3\}$. La paire de zones Z_1 et Z_2 a donc en commun uniquement la source d'indice $\ell = 2$. Cette situation est illustrée sur la Figure 5.1. On précise que cet exemple n'est pas complet et ne permet pas d'extraire toutes les sources. Son rôle est uniquement pédagogique est il permet de visualiser aisément la situation.

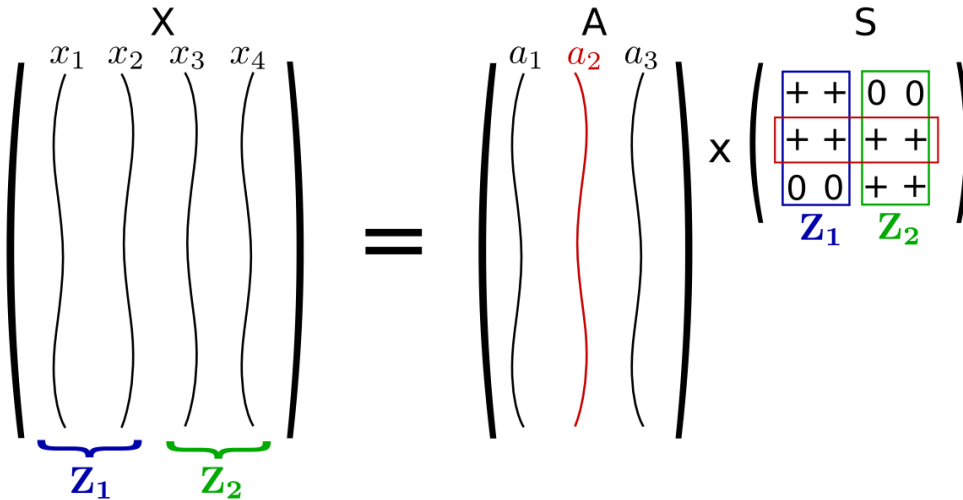


FIGURE 5.1 – Représentation schématique d'un exemple simple d'un mélange de 3 sources. Les zones Z_1 et Z_2 forment une paire dont l'intersection est mono-source. La source partagée par les deux zones est encadrée en rouge.

Définissons les différents sous-espaces associés à chaque zone Z_1 et Z_2 . Les combinaisons linéaires des vecteurs observés des zones Z_1 et Z_2 génèrent respectivement deux sous-espaces,

notés \mathcal{Z}_1 et \mathcal{Z}_2 , chacun supposé de dimension 2. Dans le but de garantir la dimension des deux sous-espaces \mathcal{Z}_1 et \mathcal{Z}_2 , il est nécessaire d'introduire l'hypothèse suivante :

Hypothèse 10 : Pour chaque zone d'analyse Z , le nombre de vecteurs observés x_m linéairement indépendants est égal au nombre de sources actives dans Z .

On a :

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_1 &= \{z_1 \mid z_1 = \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2, \quad \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}\}, \\ \mathcal{Z}_2 &= \{z_2 \mid z_2 = \alpha_3 x_3 + \alpha_4 x_4, \quad \alpha_3, \alpha_4 \in \mathbb{R}\}.\end{aligned}\tag{5.2}$$

On peut modifier la définition de ces deux sous-espaces en changeant les bases associées. A partir de l'Équation (5.1) et de l'Hypothèses 10, on a :

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_1 &= \text{span}(a_1, a_2), \\ \mathcal{Z}_2 &= \text{span}(a_2, a_3).\end{aligned}\tag{5.3}$$

où l'opérateur span définit l'ensemble des combinaisons linéaires des vecteurs.

La matrice A étant supposée de rang de colonne plein, le sous-espace de \mathbb{R}^N engendré par ses colonnes est de dimension 3. Selon la relation de Grassmann [60], on a :

$$\dim(\mathcal{Z}_1) + \dim(\mathcal{Z}_2) = \dim(\mathcal{Z}_1 + \mathcal{Z}_2) + \dim(\mathcal{Z}_1 \cap \mathcal{Z}_2),\tag{5.4}$$

où la somme $\mathcal{Z}_1 + \mathcal{Z}_2$ coïncide avec le sous-espace engendré par A . Par conséquent, l'intersection $\mathcal{Z}_1 \cap \mathcal{Z}_2$ est de dimension 1. Elle est composée des éléments inclus à la fois dans \mathcal{Z}_1 et \mathcal{Z}_2 . A partir de l'Équation (5.3), une base de l'intersection est évidente. Les éléments de l'intersection sont définis par :

$$\mathcal{Z}_1 \cap \mathcal{Z}_2 = \{v \mid v = \beta a_2, \quad \beta \in \mathbb{R}\}.\tag{5.5}$$

La géométrie de cet exemple est illustrée sur la Figure 5.2.

L'intersection $\mathcal{Z}_1 \cap \mathcal{Z}_2$ fournit une colonne de la matrice de mélange A à un facteur d'échelle β près. Cette indétermination d'échelle, peut être compensée si une normalisation des colonnes de A est possible. L'indétermination du signe peut être compensée si les coefficients de mélange sont non négatifs.

A partir de cette propriété de l'intersection, nous déduisons une méthode pour estimer les colonnes de la matrice de mélange A uniquement à partir des données X . Dans la section suivante nous présentons les différentes étapes de la méthode SIBIS dans le cas général.

5.2 La méthode SIBIS

La méthode SIBIS permet de décomposer les signaux observés mélangés en un ensemble de L signaux sources et de coefficients de mélange associés. La méthode procède en différentes étapes :

- Détection des paires de zones satisfaisant la contrainte d'intersection mono-source (*Hypothèse 9*),
- Estimation de la matrice de mélange A ,
- Reconstruction de la matrice des sources S .

Chacune de ces étapes est détaillée dans les sections suivantes.

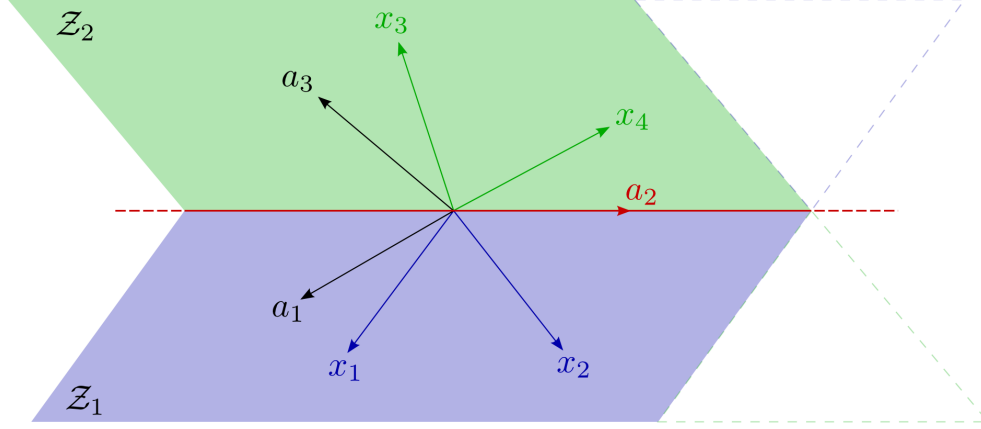


FIGURE 5.2 – Géométrie de l'exemple simple. Les sous-espaces \mathcal{Z}_1 et \mathcal{Z}_2 associés aux zones Z_1 et Z_2 s'intersectent en un sous-espace de dimension 1 contenant a_2 .

5.2.1 Identification des paires de zones IMS

L'objectif de cette étape est de segmenter le domaine d'analyse en régions homogènes, puis d'identifier toutes les paires de zones dont l'intersection est mono-source. Une région homogène est définie selon deux caractéristiques : les pixels appartenant à cette région possèdent les mêmes sources actives et deux régions homogènes voisines n'ont pas les mêmes sources actives.

5.2.1.1 Segmentation

La segmentation est basée sur l'algorithme de "Split and Merge", bien connu en traitement des images [61], adapté aux données hyperspectrales. L'algorithme de segmentation procède en deux étapes distinctes.

En premier lieu, le domaine d'analyse est divisé en petites zones Z (typiquement 5×5 pixels). Le domaine d'analyse est exploré en utilisant des zones adjacentes ou recouvrantes. Pour chaque zone, on estime la dimension du sous-espace associé (*i.e.* le nombre de sources actives dans la zone) en utilisant la méthode décrite dans la Section 1.3.1. On notera que cette étape diffère de l'algorithme "Split and Merge" original. Dans notre cas, le domaine d'analyse est entièrement divisé au lieu de procéder par dichotomie à l'aide d'un critère de décision.

La seconde étape consiste à regrouper les zones voisines Z si leur union est homogène. Dans ce but, on compare chaque zone avec tous ses voisins. Si deux zones voisines ont les mêmes sources actives, elles sont fusionnées. Ensuite, on étudie les nouveaux voisins de la zone ainsi mise à jour. Ce processus est itéré jusqu'à ce qu'il ne reste plus de fusion possible. Le critère de fusion est basé sur le nombre de sources actives dans chaque zone opérande Z_1 et Z_2 (*i.e.* sur la dimension de \mathcal{Z}_1 et \mathcal{Z}_2). Si :

$$\dim(\mathcal{Z}_1) = \dim(\mathcal{Z}_2) = \dim(\mathcal{Z}_1 + \mathcal{Z}_2), \quad (5.6)$$

alors l'union des zones Z_1 et Z_2 est homogène, elles sont donc fusionnées. Au final, on obtient un domaine d'analyse segmenté en K zones homogènes.

5.2.1.2 Intersections mono-sources

La recherche des paires de zones partageant une unique source est également basée sur la dimension des sous-espaces associés à chaque zone. On souhaite trouver toutes les paires de sous-espaces dont l'intersection est mono-dimensionnelle. Pour chacune des $\frac{K!}{2!(K-2)!}$ paires possibles, on estime la dimension de l'intersection avec la relation de Grassmann Eq. (5.4). On identifie toutes les paires de zones satisfaisant la relation :

$$\dim(\mathcal{Z}_p \cap \mathcal{Z}_q) = \dim(\mathcal{Z}_p) + \dim(\mathcal{Z}_q) - \dim(\mathcal{Z}_p + \mathcal{Z}_q) = 1, \quad (5.7)$$

avec $1 \leq p < q \leq K$.

5.2.2 Estimation de la matrice de mélange

L'identification des colonnes de la matrice de mélange A est réalisée en estimant toute les intersections mono-dimensionnelles. Soit Z_p et Z_q une paire de zones dont l'intersection est mono-dimensionnelle et \mathcal{Z}_p et \mathcal{Z}_q les deux sous-espaces associés. Les zones Z_p et Z_q partagent la source d'indice $k \in [1, L]$.

Avant d'estimer l'intersection, il est nécessaire d'obtenir une base de \mathcal{Z}_p et une base de \mathcal{Z}_q . Notons d_p et d_q les dimensions respectives de ces sous-espaces. N'importe quelle base étant adaptée, on choisit simplement les bases orthogonales (bases propres) fournies par la décomposition en valeurs singulières (SVD pour *Singular Value Decomposition* en anglais) des matrices $X(Z_p)$ et $X(Z_q)$. On note que les bases des quatre sous-espaces fondamentaux associés à une matrice peuvent être identifiées par SVD [60]. On a :

$$\begin{aligned} X(Z_p) &= U_p \Sigma_p V_p^T, \\ X(Z_q) &= U_q \Sigma_q V_q^T. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Une base orthogonale de \mathcal{Z}_p (resp. \mathcal{Z}_q) est donnée par les d_p (resp. d_q) premières colonnes de U_p (resp. U_q). Nous obtenons ainsi deux bases dont les vecteurs colonnes p_i et q_j forment les matrices P et Q . Ces deux bases sont respectivement associées à Z_p et Z_q selon :

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_p &= \text{span}(p_i), \quad \forall i \in [1, d_p] \\ \mathcal{Z}_q &= \text{span}(q_j), \quad \forall j \in [1, d_q]. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Soit v un élément de l'intersection $\mathcal{Z}_p \cap \mathcal{Z}_q$, alors $v \in \mathcal{Z}_p$ et $v \in \mathcal{Z}_q$. Donc v peut être exprimé dans les deux bases :

$$v = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \cdots + \alpha_{d_p} p_{d_p} \quad (5.10)$$

$$v = \beta_1 q_1 + \beta_2 q_2 + \cdots + \beta_{d_q} q_{d_q}, \quad (5.11)$$

avec $\alpha_i, \beta_j \in \mathbb{R}$. On en déduit alors :

$$\alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \cdots + \alpha_{d_p} p_{d_p} - (\beta_1 q_1 + \beta_2 q_2 + \cdots + \beta_{d_q} q_{d_q}) = 0. \quad (5.12)$$

Soit la matrice $M = [p_1 \dots p_{d_p} \quad -q_1 \dots -q_{d_q}]$ et le vecteur $\theta = [\alpha_1 \dots \alpha_{d_p} \quad \beta_1 \dots \beta_{d_q}]^T$. L'Équation (5.12) peut s'écrire sous la forme matricielle suivante :

$$M\theta = 0. \quad (5.13)$$

Nous reconnaissons alors la définition de $\ker(M)$, le noyau de l'application linéaire associée à la matrice M . La résolution de ce système linéaire permet donc au travers de (5.10) ou (5.11) d'obtenir une base de l'intersection $\mathcal{Z}_p \cap \mathcal{Z}_q$.

De plus, le théorème du rang [60] pour une matrice M ($n \times d$) avec $d = d_p + d_q$ donne la relation :

$$rg(M) + \dim(\ker(M)) = d, \quad (5.14)$$

où $rg(M)$ est le rang de colonne de M . La matrice M étant composée de l'union des deux bases P et Q , on a $rk(M) = \dim(\mathcal{Z}_p + \mathcal{Z}_q)$. Le nombre de colonnes d correspond à la somme des dimensions des deux sous-espace \mathcal{Z}_p et \mathcal{Z}_q , i.e. $d = \dim(\mathcal{Z}_p) + \dim(\mathcal{Z}_q)$. Selon Eq. (5.7) et Eq. (5.14), on a :

$$\dim(\ker(M)) = 1. \quad (5.15)$$

On en conclut alors que l'équation (5.13) possède une unique solution (en dehors de la solution triviale $\theta = 0$), et cette solution nous donne précisément les paramètres de la base de l'intersection. L'intersection $\mathcal{Z}_p \cap \mathcal{Z}_q$ étant mono-dimensionnelle par construction, identifier une base du noyau de l'application linéaire associée à la matrice M permet d'obtenir de façon certaine une base de l'intersection.

Comme nous l'avons mentionné précédemment, la SVD fournit une base des sous-espaces fondamentaux associés à la matrice $M = U_m \Sigma_m V_m^T$. Dans notre cas, $\ker(M)$ étant mono-dimensionnelle, une base du noyau est donnée par la dernière colonne de V_m (noté v_d). Donc $\theta = v_d$, ce qui permet d'obtenir v selon l'Équation (5.10) ou (5.11). Le vecteur v est alors utilisé comme base de l'intersection :

$$\mathcal{Z}_p \cap \mathcal{Z}_q = \{v \mid v = \beta a_k, \quad \beta \in \mathbb{R}\}, \quad (5.16)$$

où $k \in [1, L]$ est l'indice de la source partagée par \mathcal{Z}_p et \mathcal{Z}_q . Cette intersection donne une estimation de la colonne de A associée à la source partagée par \mathcal{Z}_p et \mathcal{Z}_q . Cette étape d'identification des intersections est répétée pour chaque paire de zones retenues dans l'étape précédente. Ainsi, nous obtenons en ensemble de colonnes potentielles de A . Les colonnes sont généralement estimées de nombreuses fois à cause de leur possible présence dans de nombreuses intersections. Pour compenser cette sur-représentation, nous appliquons une étape de classification (algorithme du K-means [131]) dans le but de regrouper en L classes les estimations correspondant à la même colonne de la matrice de mélange. La moyenne de chaque classe est utilisée pour former une colonne de la matrice \hat{A} (l'estimation de A). Notons que les colonnes de \hat{A} sont obtenues dans un ordre arbitraire et à un facteur d'échelle près.

5.2.3 Reconstruction des sources

L'étape finale de la méthode consiste à estimer les L sources spatiales à partir des spectres élémentaires et des observations, sous la contrainte de non négativité. Cette procédure est identique à celle utilisée dans les chapitres 3 et 4. Le lecteur peut se reporter à la Section

3.2.1.3 illustrant l'utilisation de l'algorithme NNLS [88] dans notre contexte.

En pratique, l'algorithme de SIBIS se résume donc à :

Entrées : X l'ensemble des bandes spectrales observées, L le nombre de sources.

Sorties : A les spectres élémentaires, S les cartes sources.

1. Segmentation du cube de données en régions homogènes :
 - Parcours de tout l'espace spatial du cube et estimation pour chaque zone Z du nombre de sources actives en utilisant la méthode décrite dans la Section 1.3.1.
 - Fusion des régions connexes ayant les mêmes sources actives suivant le critère Eq. (5.6).
2. Détection des paires de zones ayant une unique source en commun (paires IMS) suivant la relation Eq. (5.7).
3. Estimation de la colonne de la matrice de mélange associée à chaque paire IMS :
 - Résolution du système Eq. (5.13) avec la SVD.
 - Le paramètre θ ainsi obtenu permet de définir une base de l'intersection des deux zones avec la relation (5.10) ou (5.11).
4. Classification des colonnes potentielles précédemment obtenues en L ensembles. Le centre de chaque cluster donne une estimation de chaque colonne de A .
5. Reconstruction des sources par NNLS avec Eq. (3.6).

5.3 Résultats expérimentaux

Pour évaluer les performances de SIBIS, nous réalisons deux expériences. Dans un premier temps, nous appliquons la méthode SIBIS à des données synthétiques ne contenant aucune zone (ou pixel) mono-source, mais satisfaisant l'*Hypothèse 9*. Nous comparons les performances obtenues avec celles obtenues avec la MC-NMF. Dans un second temps, nous appliquons la méthode SIBIS aux données de NGC7023-NW cartographiée par IRS-Spitzer (voir Section 2.6, et plus particulièrement la Figure 2.9 présentant ces données) et nous comparons les résultats obtenus avec ceux estimés par deux autres méthodes.

5.3.1 Tests sur données synthétiques

Nous construisons 3 cubes de données contenant respectivement 3, 4 et 6 sources. Ces données synthétiques modélisent, au même titre que celle utilisée dans les chapitres 3 et 4, les propriétés spectrales des données HIFI-Herschel, *i.e.* chaque spectre élémentaire ne contient qu'une unique raie d'émission modélisée par une fonction Gaussienne (voir Section 3.3.1.1).

Les cartes d'abondance associées sont construites de manière à respecter les deux critères suivants : il n'existe aucune zone (ou pixel) mono-source dans les données et chaque source est accessible (*Hypothèse 9*). Pour chaque source spatiale active, les coefficients d'abondance sont générés suivant une distribution uniforme sur l'intervalle $[0.5, 1.5]$. La valeur des coefficients d'abondance appartenant à une région où cette source est inactive est fixée à 0. Pour finir,

on ajoute à chaque cube de données un bruit blanc Gaussien de manière à obtenir un SNR de 30, 20 ou 10 dB.

Les mesures de performance utilisées sont le SAM pour les spectres estimés et le NRMSE pour les cartes d'abondance (voir Section 3.3.2.1 pour plus de détails). L'ensemble des résultats obtenus est présenté dans le tableau 5.1.

Cube n° 1 (3 sources)				
SNR		30 dB	20 dB	10 dB
SIBIS	NRMSE	0,32 %	1,12 %	3,24 %
	SAM (rad)	4,76e-3	1,43e-2	4,10e-2
MC-NMF	NRMSE	1,45 %	2,35 %	7,39 %
	SAM (rad)	1,37e-2	2,69e-2	6,61e-2
Cube n° 2 (4 sources)				
SNR		30 dB	20 dB	10 dB
SIBIS	NRMSE	0,72 %	2,54 %	15,96 %
	SAM (rad)	9,09e-3	3,03e-2	0,18
MC-NMF	NRMSE	9,55 %	13,62 %	17,31 %
	SAM (rad)	9,73e-2	0,14	0,16
Cube n° 3 (6 sources)				
SNR		30 dB	20 dB	10 dB
SIBIS	NRMSE	0,69 %	6,04 %	52,69 %
	SAM (rad)	9,34e-3	7,79e-2	0,31
MC-NMF	NRMSE	11,25 %	14,77 %	19,94 %
	SAM (rad)	7,77e-2	0,10	0,16

TABLE 5.1 – Mesures de performances obtenus par les méthodes SIBIS et MC-NMF pour chacun des trois cubes de données simulées. Les résultats en gras identifient les cas où l'estimation de la MC-NMF est meilleure que celle de SIBIS.

Le premier constat est que la méthode SIBIS donne d'excellentes performances sur les 3 cubes de données pour les niveaux de bruit les plus raisonnables. Dans le cas des mélanges avec un SNR de 30 dB, le NRMSE est inférieur à 1 % et le SAM inférieur à 0,01 rad. Dans le cas des mélanges avec un SNR de 20 dB, le NRMSE atteint 6 % et le SAM 0,08 rad pour le cube n° 3. Le cas des mélanges contenant 10 dB de bruit est plus mitigé. Les performances atteintes restent acceptables pour les cubes n° 1 et 2, malgré une nette augmentation des critères de performances vis à vis des mêmes mélanges mais avec un SNR supérieur. En revanche la méthode échoue à extraire toutes les sources pour le cube n° 3 avec 10 dB de bruit, le NRMSE moyen atteint dans ce cas 53 % et le SAM 0,31 rad.

En comparaison avec la MC-NMF, on constate que SIBIS donne globalement de meilleurs résultats, à deux exceptions près. Dans le cas du cube n° 2 avec 10 dB de bruit, les deux méthodes sont équivalentes. Dans le cas du cube n° 3 avec 10 dB de bruit, la méthode SIBIS échoue dans la décomposition, alors que la MC-NMF donne une estimation grossière de toutes les composantes (20% pour le NRMSE et 0,16 rad pour le SAM).

Nos premières conclusions impliquent que l’erreur conséquente observée pour les cubes n° 2 et 3 avec 10 dB de bruit est due à la méthode d’estimation du nombre de sources (méthode connue pour être sensible au bruit). Les erreurs d’estimation du nombre de sources entraînent une segmentation incorrecte du domaine d’analyse et donc une estimation approximative des différentes bases nécessaires à la méthode.

De plus, un faible nombre d’observations rend l’estimation du nombre de sources plus difficile, les zones d’analyse de 5×5 pixels contiennent peu d’observations pour estimer correctement un nombre élevé de sources. En effet, on constate dans le cas d’un mélange de trois sources avec 10 dB de bruit, que la méthode SIBIS donne des résultats très corrects. Ceci est dû au faible nombre de sources dans chaque région homogène d’une part (2 sources par région) et au fait que les régions homogènes sont plus grandes dans le cube n° 1 que dans les deux autres, d’autre part.

Cependant, si les données sont correctement segmentées, la construction d’une base pour chaque zone et pour chaque intersection avec la SVD a un “effet moyennneur” sur les observations contenues dans chaque zone. Ainsi, le bruit blanc ajouté aux observations est atténué par la SVD.

5.3.2 Test sur données réelles

Dans cette seconde expérience, nous appliquons SIBIS aux données de NGC7023-NW cartographiée par IRS-Spitzer. Nous comparons les résultats obtenus à ceux obtenus par deux autres approches. Dans une première étude, O. Berné et al. [16] ont utilisé la NMF pour réaliser la décomposition du cube hyperspectral. La méthode géométrique MASS étudiée dans le chapitre précédent est également applicable à ces données (voir [23]). En effet, la présence de pixel observés mono-sources est une hypothèse réaliste dans ce cas. En revanche, à cause du faible nombre de pixels (29×39), l’image ne contient pas de zones mono-sources (ou quasiment mono-sources) permettant l’utilisation de SpaceCORR ou de ses versions hybrides. Cependant, la distribution des sources spatiales obtenues par la NMF suggère que chaque source est spatialement accessible, l’*Hypothèse 9* est valide.

Les résultats obtenus sont présentés sur la Figure 5.3. On notera que les spectres extraits sont normalisés tels qu’ils s’intègrent à 1 et sont présentés dans un ordre arbitraire. Cela renforce la confiance à l’égard des résultats de ces trois méthodes dans ce contexte réellement aveugle, *i.e.* où les spectres élémentaires sont inconnus.

On observe que la méthode SIBIS réalise la décomposition du cube avec succès. Les composantes spectrales estimées sont équivalentes à celles extraites par la NMF ou par MASS.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons proposé une méthode de SAS géométrique. L’objectif visé était de proposer une extension à la méthode SpaceCORR utilisant de petites zones d’analyse parcimonieuses pour résoudre le problème de SAS. Cette extension se traduit par le relâchement de l’hypothèse de présence de zones mono-sources en permettant que plusieurs sources soient actives par zone. La méthode SIBIS nécessite des données présentant la propriété de parcimonie suivante : il existe pour chaque source au moins une paire de zones

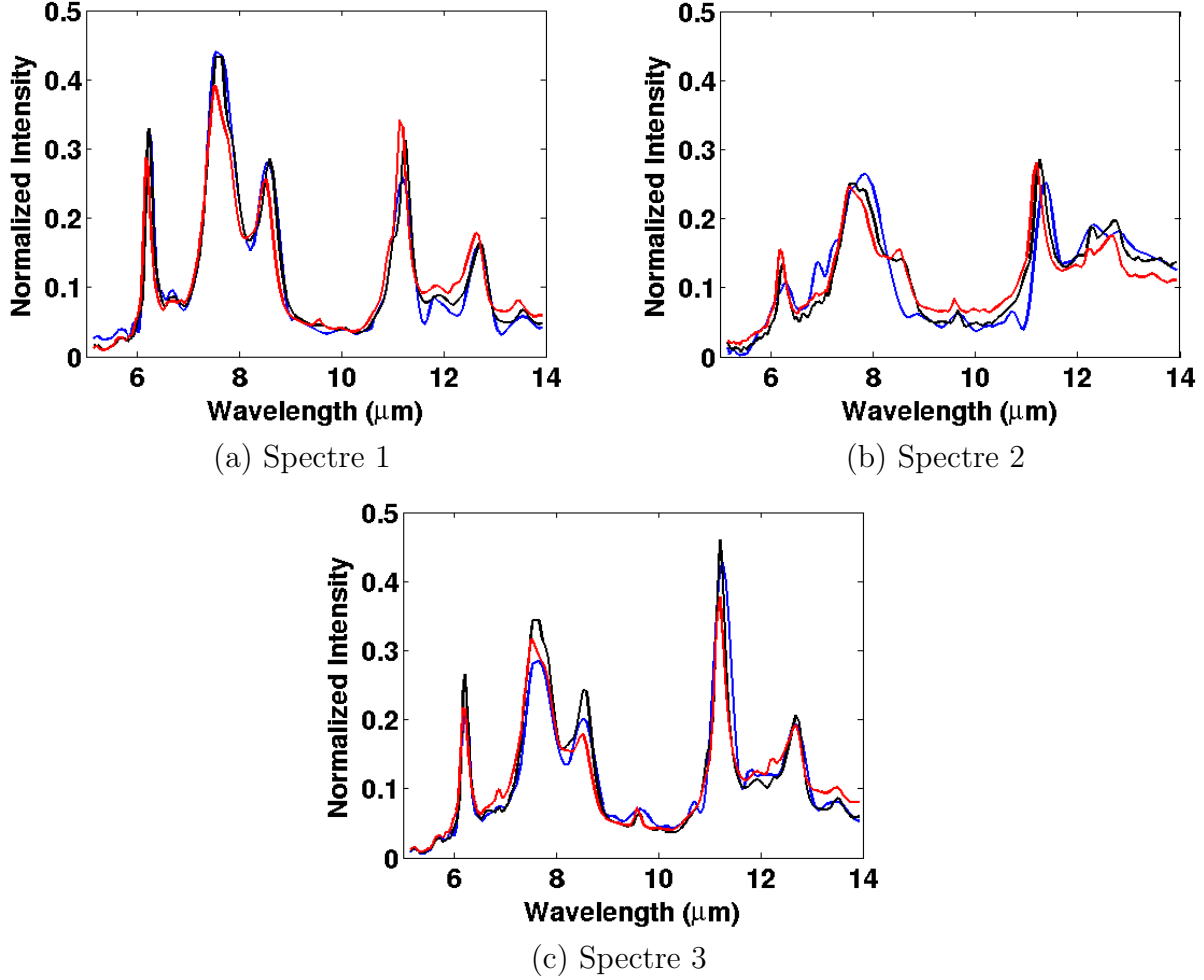


FIGURE 5.3 – Composantes spectrales extraites des données de NGC7023-NW cartographiée par IRS-Spitzer. Les spectres en bleu sont ceux extraits avec la NMF, ceux en noir sont extraits avec MASS et ceux en rouge sont extraits avec SIBIS.

d’analyse partageant uniquement cette source.

Nous avons ensuite effectué des tests préliminaires sur données synthétiques permettant d’évaluer les performances de la méthode en comparaison aux performances atteintes par la MC-NMF. Pour finir, nous avons utilisé SIBIS sur un jeu de données réelles. Les résultats obtenus sont équivalents à ceux obtenus par la NMF et par MASS et nous permettent de valider cette approche.

Ces tests préliminaires ouvrent plusieurs pistes d’amélioration de la méthode, avec en priorité celle de rendre l’estimation du nombre de sources actives dans une zone plus robuste au bruit. On définit ci-après un ensemble de tests complémentaires et variantes possibles pour la méthode :

- La construction de données synthétiques plus réalistes permettrait d’évaluer plus finement les performances et les possibilités de la méthode SIBIS.

- La méthode permettant aux signaux d’avoir des échantillons négatifs, l’étude du cas de données non négatives dans lesquelles le bruit introduit des valeurs négatives serait intéressante.
- L’hybridation de SIBIS avec la MC-NMF, au même titre que les méthodes SpaceCORR et MASS, permettrait d’améliorer les performances de SIBIS dans les situations critiques d’accessibilité des sources et de niveau de bruit trop élevé.
- Une extension intéressante de la méthode serait de combiner SIBIS avec SpaceCORR pour prendre en compte la présence dans les données d’éventuelles zones mono-sources.

Conclusion générale et perspectives

Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes intéressés à la résolution du problème de mélange des données hyperspectrales issues de la cartographie des régions de photodissociation en astrophysique. Nous avons, dans un premier temps, étudié la littérature et les méthodes déjà utilisées dans ce contexte. Dans un second temps, nous avons proposé nos propres contributions pour valider, puis améliorer les résultats existants, ou permettre de résoudre des cas de mélange plus difficiles.

La première partie du manuscrit portant sur l'état de l'art de la SAS et de l'imagerie hyperspectrale nous a permis de définir progressivement le positionnement de nos travaux. Dans le premier chapitre, nous avons présenté les principes de la SAS ainsi qu'un panorama des différentes classes de méthodes existantes pour traiter le cas d'un mélange linéaire instantané pour une application quelconque.

Dans le second chapitre, nous avons abordé les différents aspects de la SAS pour la décomposition d'images hyperspectrales en observation de la Terre et en astrophysique. Le cas de l'observation de la Terre ne nous concerne pas directement mais cette application étant abondamment étudiée dans la littérature, il était nécessaire de l'évoquer dans ce manuscrit. Nous avons donc, pour ces deux applications, décrit les phénomènes de mélange puis détaillé la modélisation des données, en insistant sur l'absence de somme à un des coefficients d'abondance rendant inutilisable la majorité des méthodes de SAS employés en observation de la Terre. Nous avons ensuite établi un panorama des méthodes SAS utilisées en imagerie hyperspectrale.

Pour finir sur cette première partie, nous avons détaillé la nature de nos images. Les trois jeux de données hyperspectrales à notre disposition présentent les caractéristiques suivantes : les sources (spatiales ou spectrales) sont corrélées, les données sont non négatives et elles présentent de la parcimonie conjointe spatiale. L'étude des méthodes de la littérature et des propriétés de nos données nous a donc permis d'affiner notre choix méthodologique.

Notre première contribution a été détaillée dans le chapitre trois. En premier lieu, nous avons étudié les limites des méthodes NMF et SpaceCORR utilisées seules puis proposé plusieurs solutions pour améliorer les résultats obtenus par les méthodes seules. La première solution proposée est d'initialiser la NMF avec les résultats obtenus par SpaceCORR. Ainsi, même si SpaceCORR fournit une estimation grossière d'une ou plusieurs composantes, les résultats approximatifs sont affinés par la NMF. Les autres solutions proposées ont abouti à la construction des méthodes MASS et SIBIS détaillées dans les chapitres quatre et cinq.

Pour évaluer l'apport des méthodes hybrides par rapport à l'utilisation de la NMF et de

SpaceCORR seules, nous avons construit un ensemble de données synthétiques réalistes permettant de mesurer l'impact du taux de parcimonie, du nombre de sources et du niveau de bruit sur les résultats. Nous avons ainsi pu définir les conditions d'application des méthodes hybrides. Pour finir, nous avons validé ces expérimentations en appliquant nos méthodes sur données réelles et en comparant nos résultats à ceux obtenus avec les méthodes NMF et SpaceCORR utilisées seules. La pertinence des résultats nous a permis de valider cette première proposition.

Dans le chapitre quatre, nous avons proposé une méthode originale permettant de réduire la dimension des zones d'analyse de la méthode SpaceCORR à un unique pixel. La méthode géométrique MASS nécessite en contrepartie des données non négatives. MASS est basée sur l'hypothèse qu'il existe pour chaque source au moins un pixel observé où seule cette source est active. Nous avons également proposé une hybridation de MASS et de la NMF pour tirer parti des avantages des deux méthodes utilisées seules.

Nous avons évalué les performances de MASS et de ses versions hybrides sur les mêmes données synthétiques que celles utilisées pour SpaceCORR. Nous avons ainsi pu définir les conditions d'application de MASS. De plus, cela nous a permis de comparer les performances de SpaceCORR et de MASS ainsi que de leurs version hybrides respectives. Pour finir, nous avons utilisé MASS et ses versions hybrides sur les données réelles qui ont motivé cette contribution. La cohérence des résultats obtenus, nous permet de valider l'efficacité de la méthode MASS.

Dans le chapitre cinq, nous avons proposé une méthode originale permettant aux petites zones d'analyse utilisées par SpaceCORR d'avoir plusieurs sources actives. La méthode SIBIS est basée sur l'hypothèse qu'il existe pour chaque source au moins une paire de zones d'analyse partageant uniquement cette source.

Pour évaluer les performances de SIBIS, nous avons effectué des tests préliminaires sur données synthétiques et comparé ces résultats avec ceux obtenus avec la NMF. Pour finir, nous avons utilisé SIBIS sur un jeu de données réelles. Les résultats obtenus sont équivalents à ceux obtenus par la NMF et par MASS et nous permettent de valider cette approche.

En bilan de ces travaux de thèse, l'ensemble des méthodes proposées a été appliqué sur des données réelles. Il en ressort deux points importants. Tout d'abord les méthodes hybrides proposées permettent une réduction significative de la dispersion des solutions de la NMF, rendant la solution obtenue quasi-unique. Cette propriété permet d'affiner les résultats obtenus précédemment avec la NMF utilisée seule. D'autre part l'utilisation des versions hybrides de MASS a permis de décomposer une image hyperspectrale en un jeu de spectres élémentaires et de cartes d'abondance associées physiquement interprétables alors que la NMF utilisée seule ne donnait pas de résultats cohérents.

Les méthodes originales MASS et SIBIS sont présentées respectivement dans les articles [23] et [24].

Par ailleurs, les résultats concluants obtenus avec MASS et SIBIS permettent d'envisager plusieurs perspectives ou compléments mentionnés ci-dessous.

En ce qui concerne la méthode MASS :

- Il serait intéressant de comparer la méthode MASS aux rares méthodes géométriques de la littérature basées sur la présence de pixels purs mais ne nécessitant pas la somme à un des coefficients d'abondance.

En ce qui concerne la méthode SIBIS :

- La construction de données synthétiques plus réalistes permettrait d'évaluer plus finement les performances et les possibilités de la méthode SIBIS.
- Puisque la méthode permet aux signaux sources d'avoir des échantillons négatifs, l'étude du cas de données dans lesquelles le bruit introduit des valeurs négatives serait intéressante.
- L'hybridation de SIBIS avec la MC-NMF, au même titre que les méthodes SpaceCORR et MASS, permettrait d'améliorer les performances de SIBIS dans les situations critiques d'accessibilité des sources et de niveau de bruit trop élevé.
- Une extension intéressante de la méthode serait de combiner SIBIS avec SpaceCORR pour prendre en compte la présence dans les données d'éventuelles zones mono-sources.

Bibliographie

- [1] F. Abrard and Y. Deville. A time-frequency blind signal separation method applicable to underdetermined mixtures of dependent sources. *Signal Processing*, pages 1389–1403, 2005.
- [2] F. Abrard, Y. Deville, and P. White. From blind source separation to blind source cancellation in the underdetermined case : a new approach based on time-frequency analysis. In *Proceedings of International Symposium on Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*, 2001.
- [3] F. Abrard, Y. Deville, and P. White. A new source separation approach based on time-frequency analysis for instantaneous mixtures. In *Proceedings of International Workshop on Electronics, Control, Modelling, Measurement and Signals (ECM2S)*, 2001.
- [4] J. Aumont and J.F. Macias-Perez. Blind component separation for polarized observations of the cmb. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 376 :739–758, 2007.
- [5] M. Babaie-Zadeh and C. Jutten. A general approach for mutual information minimization and its application to blind source separation. *Signal Processing*, page 975–995, 2005.
- [6] C. Baccigalupi, F. Perrotta, G. De Zotti, G. F. Smoot, C. Burigana, D. Maino, L. Bedini, and E. Salerno. Extracting cosmic microwave background polarisation from satellite astrophysical maps. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 354 :55–70, 2004.
- [7] J. Bayliss, J.A. Gualtieri, and R.F. Crompt. Analyzing hyperspectral data with independent component analysis. *SPIE AIPR Workshop*, pages 133–143, 1997.
- [8] A. Belouchrani, K. Abed-Meraim, J.-F. Cardoso, and E. Moulines. A blind source separation technique using second order statistics. *IEEE Transactions on Signal Processing*, pages 434–444, 1997.
- [9] A. Belouchrani and J.-F. Cardoso. Maximum likelihood source separation for discrete sources. In *Proceedings of EUSIPCO*, page 768–771, 1994.
- [10] D. Benachir, Y. Deville, and S. Hosseini. Blind spatial unmixing of multispectral images : An approach based on two-source sparsity and geometrical properties. *IEEE International Conference ICASSP*, pages 3171–3175, 2014.
- [11] D. Benachir, S. Hosseini, Y. Deville, M. Karoui, and A. Hameurlain. Modified independent component analysis for initializing non-negative matrix factorization : An approach to hyperspectral image unmixing. *International Workshop on Electronics, Control, Modelling, Measurement and Signals (ECMS)*, 2013.

- [12] M. Berman, H. Kiiveri, R. Lagerstrom, A. Ernst, R. Dunne, and J. F. Huntington. Ice : A statistical approach to identifying endmembers in hyperspectral images. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, page 2085–2095, 2004.
- [13] O. Berné. *Evolution des très petites particules de poussière carbonée dans le cycle cosmique de la matière : méthodes de séparation aveugle de sources et spectro-imagerie avec le télescope spatial Spitzer*. PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse 3, 2008.
- [14] O. Berné, A. Boulais, Y. Deville, and C. Joblin. Nmf-based spectral unmixing of herschel observations of the horsehead nebula. *IEEE International Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing : Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)*, 2013.
- [15] O. Berné, C. Joblin, Y. Deville, P. Pilleri, J. Pety, D. Teyssier, M. Gerin, and A. Fuente. Blind decomposition of herschel-hifi spectral maps of the ngc 7023 nebula. *In proceedings of Société Française d’Astronomie et d’Astrophysique (SF2A)*, 2012.
- [16] O. Berné, C. Joblin, Y. Deville, J.D. Smith, M. Rapacioli, J. P. Bernard, J. Thomas, W. Reach, and A. Abergel. Analysis of the emission of very small dust particles from spitzer spectro-imagery data using blind signal separation methods. *Astronomy and Astrophysics*, pages 575–586, 2007.
- [17] J.M. Bioucas-Dias. A variable splitting augmented lagrangian approach to linear spectral unmixing. *IEEE Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing Evolution in Remote Sensing (WHISPERS)*, 2009.
- [18] J.M. Bioucas-Dias and J.M.P. Nascimento. Hyperspectral subspace identification. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, pages 2435–2445, 2008.
- [19] José M. Bioucas-dias, Antonio Plaza, Nicolas Dobigeon, Mario Parente, Qian Du, Paul Gader, and Jocelyn Chanussot. Hyperspectral unmixing overview : Geometrical, statistical, and sparse regression-based approaches. *IEEE J. Sel. Topics Appl. Earth Observ. Remote Sens.*, pages 354–379, 2012.
- [20] J.W. Boardman, F.A. Kruse, and R.O. Green. Mapping target signatures via partial unmixing of aviris data. *Fifth JPL Airborne Earth Science Workshop*, page 23–26, 1995.
- [21] J. Bobin, Y. Moudden, J.L. Starck, J. Fadili, and N. Aghanim. Sz and cmb reconstruction using generalized morphological component analysis. *Statistical Methodology*, pages 307–317, 2008.
- [22] J. Bobin, J. Rapin, A. Larue, and J.L. Starck. Sparsity and adaptivity for the blind separation of partially correlated sources. *IEEE Transactions on Signal Processing*, pages 1199–1213, 2015.
- [23] A. Boulais, Y. Deville, and O. Berné. A geometrical blind separation method for unconstrained-sum locally dominant sources. *IEEE International Workshop ECMSM*, 2015.
- [24] A. Boulais, Y. Deville, and O. Berné. A blind identification and source separation method based on subspace intersections for hyperspectral astrophysical data. *IEEE International Conference of Latent Analysis and Signal Separation (LVA-ICA)*, 2017.

- [25] C. Boutsidis and E. Gallopoulos. Svd based initialization : A head start for nonnegative matrix factorization. *Pattern Recognition*, pages 1350–1362, 2008.
- [26] J.-F. Cardoso and A. Souloumiac. Blind beamforming for non gaussian signals. *IEE Proceedings-F Radar and Signal Processing*, page 362–370, 1993.
- [27] J.F. Cardoso. Independent component analysis of the cosmic microwave background. *In Proceedings of the International Workshop on Independent Component Analysis and Blind Source Separation*, 2003.
- [28] T.H. Chan, C.Y. Chi, Y.M. Huang, and W.K. Ma. A convex analysis-based minimum-volume enclosing simplex algorithm for hyperspectral unmixing. *IEEE Transactions on Signal Processing*, page 4418–4432, 2009.
- [29] S. Chandrasekhar. *Radiative transfer*. Dover publications, 1960.
- [30] C. Chaouchi. *Méthodes de séparation aveugle de sources non linéaires, étude du modèle quadratique*. PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse 3, 2011.
- [31] Z. Chen, A. Cichocki, and T.M. Rutkowski. Constrained non-negative matrix factorization method for eeg analysis in early detection of alzheimer’s disease. *IEEE International Conference ICASSP*, page 893–896, 2006.
- [32] A. Cichocki and R. Zdunek. Multilayer nonnegative matrix factorization using projected gradient approaches. *International Journal of Neural Systems*, page 431–446, 2007.
- [33] A. Cichocki, R. Zdunek, A.H. Phan, and S.I. Amari. *Nonnegative matrix and tensor factorizations : Applications to exploratory multi-way data analysis and blind source separation*. John Wiley and Sons, 2009.
- [34] Planck Collaboration. Component separation methods for the planck mission. *Astronomy and Astrophysics*, 491 :597–615, 2008.
- [35] Planck Collaboration. Planck 2013 results. xii. component separation. *Astronomy and Astrophysics*, 571, 2014.
- [36] P. Comon. Independent component analysis, a new concept ? *Signal Processing*, page 287– 314, 1994.
- [37] P. Comon and C. Jutten Eds. *Handbook of Blind Source Separation : Independent Component Analysis and Applications*. Elsevier, 2010.
- [38] P. Comon and C. Jutten. *Séparation de sources 1 ; concepts de base et analyse en composantes indépendantes*. Hermès, 2007.
- [39] P. Comon and C. Jutten. *Séparation de sources 2 ; au-delà de l’aveugle et applications*. Hermès, 2007.
- [40] M.D. Craig. Minimum-volume transforms for remotely sensed data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, page 542–552, 1994.
- [41] J. Delabrouille, J.F. Cardoso, and G. Patanchon. Multidetector multicomponent spectral matching and applications for cosmic microwave background data analysis. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 346 :1089–1102, 2003.
- [42] Y. Deville. Panorama des applications biomédicales des méthodes de séparation aveugle de sources. *In GRETSI*, pages 8–11, 2003.

- [43] Y. Deville. Temporal and time-frequency correlation-based blind source separation methods. In *Proceedings of International Symposium on Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*, pages 1–4, 2003.
- [44] Y. Deville. *Signaux temporels et spatiotemporels, Traitement du signal - Analyse des signaux, théorie de l'information, traitement d'antenne, séparation aveugle de sources*. Ellipses, 2011.
- [45] Y. Deville. Chapter 6, *Sparse component analysis : a general framework for linear and nonlinear blind source separation and mixture identification*. In G.R. Naik and W. Wang Eds, *Blind Source Separation : Advances in Theory, Algorithms and Applications*. Springer, 2014.
- [46] Y. Deville. *Blind source separation and blind mixture identification methods*, In *Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering*. Wiley, 2016.
- [47] Y. Deville and L. Andry. Application of blind source separation techniques to multi-tag contactless identification systems. *International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA)*, page 73–78, 1995.
- [48] Y. Deville, D. Bissessur, M. Puigt, S. Hosseini, and H. Carfantan. A time-scale correlation-based blind separation method applicable to correlated sources. *European Symposium on Artificial Neural Networks*, page 337–343, 2006.
- [49] Y. Deville and S. Hosseini. Blind identification and separation methods for linear-quadratic mixtures and/or linearly independent non-stationary signals. In *Proceedings of International Symposium on Signal Processing and its Applications (ISSPA)*, 2007.
- [50] Y. Deville and M. Puigt. Temporal and time-frequency correlation-based blind source separation methods. part i : determined and underdetermined linear instantaneous mixtures. *Signal Processing*, page 374–407, 2007.
- [51] Y. Deville, C. Revel, X. Briottet, and V. Achard. Characterization of hyperspectral images prior to unmixing, based on eigendecompositions and sum-to-one condition. *IEEE Whispers*, 2014.
- [52] N. Dobigeon, S. Moussaoui, J.Y. Tournet, and C. Carteret. Bayesian separation of spectral sources under non-negativity and full additivity constraints. *Signal Processing*, page 2657–2669, 2009.
- [53] N. Dobigeon, J.Y. Tournet, C. Richard, J.C.M. Bermudez, S. McLaughlin, and A.O. Hero. Nonlinear unmixing of hyperspectral images : Models and algorithms. *IEEE Signal Processing Magazine*, 31 :82–94, 2014.
- [54] D.L. Donoho and V. Stodden. When does non-negative matrix factorization give a correct decomposition into parts? In *Proceedings NIPS*, page 2004, 2003.
- [55] K. Drakakis, S. Rickard, R. De Frein, and A Cichocki. Analysis of financial data using non-negative matrix factorization. *International Mathematical Forum*, page 1853–1870, 2008.
- [56] O. Forni, F. Poulet, J.P. Bibring, S. Erard, C. Gomez, Y. Langevin, B. Gondet, and The Omega Science Team. Component separation of omega spectra with ica. *36th Annual Lunar and Planetary Science Conference*, page 1623, 2005.

- [57] S. Fourest, X. Briottet, P. Lier, and C. Valorge. *Satellite Imagery*. Cépaduès, 2012.
- [58] M. Funaro, E. Oja, and H. Valpola. Independent component analysis for artefact separation in astrophysical images. *Neural Networks*, page 469–478, 2003.
- [59] M. Gaeta and J.L. Lacoume. Estimateurs du maximum de vraisemblance étendus à la séparation de sources non gaussiennes. *Traitement du signal*, page 419–434, 1990.
- [60] G. H. Golub and C. H. Van Loan. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, 3rd edition, 1996.
- [61] R. C. Gonzalez and R. E. Woods. *Digital Image Processing, Chapter 10 : Image Segmentation*. Prentice-Hall, Inc., 2006.
- [62] N. Gorretta-Monteiro. *Proposition d’une approche de segmentation d’images hyperspectrales*. PhD thesis, Université de Montpellier II, 2009.
- [63] R. Gribonval and S. Lesage. A survey of sparse component analysis for blind source separation : principles, perspectives, and new challenges. *ESANN’06 Proceedings*, pages 323–330, 2006.
- [64] J. Gruninger, A.J. Ratkowski, and M.L. Hoke. The sequential maximum angle convex cone (smacc) endmember model. In *Algorithms for Multispectral, Hyperspectral and Ultraspectral Imagery, SPIE*, 2004.
- [65] J.C. Harsanyi and C.I. Chang. Hyperspectral image classification and dimensionality reduction : An orthogonal subspace projection approach. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, page 779–785, 1994.
- [66] S. Hosseini and Y. Deville. Blind separation of linear-quadratic mixtures of real sources using a recurrent structure. In *Proceedings of International Work-Conference on Artificial and Natural Neural Networks, IWANN*, pages 241–248, 2003.
- [67] S. Hosseini and Y. Deville. Blind maximum likelihood separation of a linear-quadratic mixture. In *Proceedings of the International Workshop on Independent Component Analysis and Blind Source Separation (ICA)*, pages 694–701, 2004.
- [68] P.O. Hoyer. Nonnegative sparse coding. In *Proceedings of IEEE Workshop on Neural Networks for Signal Processing*, page 557–565, 2002.
- [69] P.D. Hurley, S.Oliver, D. Farrah, V.Lebouteiller, and H.W.W. Spoon. Learning the fundamental mir spectral components of galaxies with non-negative matrix factorisation. *Monthly Notices of The Royal Astronomical Society*, pages 241–261, 2013.
- [70] A. Hyvärinen. Fast and robust fixed-point algorithms for independent component analysis. *IEEE Transactions on Neural Networks*, page 626–634, 1999.
- [71] A. Hyvärinen, J. Karhunen, and E. Oja. *Independent component analysis*. Wiley-interscience, 2001.
- [72] J. Héroult, C. Jutten, and B. Ans. Détection de grandeurs primitives dans un message composite par une architecture de calcul neuromimétique en apprentissage non supervisé. *GRETSI*, page 1017–1022, 1985.
- [73] A. Ifarragurri and C-I. Chang. Multispectral and hyperspectral image analysis with convex cones. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, page 756–770, 1999.

- [74] M.D. Iordache, J.M. Bioucas-Dias, , and A. Plaza. Sparse unmixing of hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, page 2014–2039, 2011.
- [75] A. Jourjine, S. Rickard, and O. Yilmaz. Blind separation of disjoint orthogonal signals : Demixing n sources from 2 mixtures. *IEEE International Conference ICASSP*, page 2985–2988, 2000.
- [76] M. Juvela, K. Lehtinen, and P. Paatero. The use of positive matrix factorization in the analysis of molecular line spectra. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 280 :616–626, 1996.
- [77] A. Kachenoura, L. Albera, and L. Senhadji. Séparation aveugle de sources en ingénierie biomédicale. *ITBM-RBM*, pages 20–34, 2007.
- [78] M.S. Karoui. *Méthodes de séparation aveugle de sources et application à la télédétection spatiale*. PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse 3, 2012.
- [79] M.S. Karoui, Y. Deville, S. Hosseini, and A. Ouamri. Blind spatial unmixing of multispectral images : New methods combining sparse component analysis, clustering and nonnegativity constraints. *Pattern Recognition*, page 4263–4278, 2012.
- [80] N. Keshava and J.F. Mustard. Spectral unmixing. *IEEE Signal Processing Magazine*, 19 :44–57, 2002.
- [81] H. Kim and H. Park. Sparse non-negative matrix factorizations via alternating non-negativity-constrained least squares for microarray data analysis. *Bioinformatics*, page 1495–1502, 2007.
- [82] B. Klingenberg, J. Curry, and A. Dougherty. Non-negative matrix factorization : Ill-posedness and a geometric algorithm. *Pattern Recognition*, 42 :918 – 928, 2009.
- [83] K.H. Knuth, M.K. Tse, J. Choinsky, H.A. Maunu, and D.F. Carbon. Bayesian source separation applied to identifying complex organic molecules in space. *Statistical Signal Processing*, page 346–350, 2007.
- [84] M. Krob and M. Benidir. Blind identification of a linear-quadratic model using higher-order statistics. *IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP)*, pages 440–443, 1993.
- [85] E. Kuruoglu. Bayesian source separation for cosmology. *IEEE Signal Processing Magazine*, page 43–54, 2010.
- [86] A.N. Langville, C.D. Meyer, and R. Albright. Initializations for the nonnegative matrix factorization. 2006.
- [87] L. De Lathauwer, D. Callaerts, B. De Moor, and and al. Fetal electrocardiogram extraction by source subspace separation. In *Proceedings of the International Workshop on HOS*, pages 134–138, 1995.
- [88] C.L. Lawson. *Solving Least Squares Problems*. Classics, 1974.
- [89] D.D. Lee and H.S. Seung. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization. *Nature*, 401 :788–791, oct 1999.
- [90] D.D. Lee and H.S. Seung. Algorithms for non-negative matrix factorization. In *In NIPS*, pages 556–562. MIT Press, 2001.

- [91] J.S. Lee, D.D. Lee, S. Choi, and D.S. Lee. Application of non-negative matrix factorization to dynamic positron emission tomography. *In Proceeding of the International Conference on Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*, page 629–632, 2001.
- [92] M. Lennon, G. Mercier, M.C. Mouchot, , and L. Hubert-Moy. Spectral unmixing of hyperspectral images with the independent component analysis and wavelet packets. *IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, pages 2896–2898, 2001.
- [93] J. Li, J. M. Bioucas-Dias, , and A. Plaza. Collaborative nonnegative matrix factorization for remotely sensed hyperspectral unmixing. *IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, page 3078–3081, 2012.
- [94] J. Li and J.M. Bioucas-Dias. Minimum volume simplex analysis : a fast algorithm to unmix hyperspectral data. *IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS)*, page 250–253, 2008.
- [95] Y. Li, S-I. Amari, A. Cichocki, D.W.C Ho, and S. Xie. Underdetermined blind source separation based on sparse representation. *IEEE Trans. on Signal Processing*, page 423–437, 2006.
- [96] C.-J. Lin. Projected gradient methods for nonnegative matrix factorization. *Neural Computation*, page 2756–2779, 2007.
- [97] J. Luo and Z. Zhang. Using eigenvalue grads method to estimate the number of signal source. *In Signal Processing Proceedings ICSP*, 2000.
- [98] W.K. Ma, J.M. Bioucas-Dias, T.H. Chan, N. Gillis, P. Gader, A.J. Plaza, A. Ambikapathi, and C.Y. Chi. A signal processing perspective on hyperspectral unmixing. *IEEE Signal Processing Magazine*, 31 :67–81, 2014.
- [99] D. Maino, A. Farusi, C. Baccigalupi, F. Perrotta, A.J. Banday, L. Bedini, C. Burigana, G. De Zotti, K. M. Górski, and E. Salerno. All-sky astrophysical component separation with fast independent component analysis (fastica). *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 334 :53–68, 2002.
- [100] I. Meganem. *Méthodes de Séparation Aveugle de Sources pour l’imagerie hyperspectrale. Application à la télédétection urbaine et à l’astrophysique*. PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse 3, 2012.
- [101] I. Meganem, Y. Deville, S. Hosseini, P. Déliot, and X. Briottet. Linear-quadratic blind source separation using nmf to unmix urban hyperspectral images. *IEEE Transactions on Signal Processing*, pages 1822–1833, 2014.
- [102] I. Meganem, Y. Deville, and M. Puigt. Blind separation methods based on correlation for sparse possibly-correlated images. *IEEE International Conference ICASSP*, pages 1334–1337, 2010.
- [103] I. Meganem, P. Déliot, X. Briottet, Y. Deville, and S. Hosseini. Linear–quadratic mixing model for reflectances in urban environments. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, pages 544–558, 2014.
- [104] I. Meganem, S. Hosseini, and Y. Deville. *Separation of stellar spectra based on non-negativity and parametric modelling of mixing operator. Invited chapter in Non-negative*

- Matrix Factorization Techniques : Advances in Theory and Applications* In G.R. Naik Ed. Springer, 2016.
- [105] L. Miao and H. Qi. Endmember extraction from highly mixed data using minimum volume constrained nonnegative matrix factorization. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, page 765–777, 2007.
 - [106] G. Morello, I.P. Waldmann, G. Tinetti, G. Peres, G. Micela, and I.D. Howarth. A new look at spitzer primary transit observations of the exoplanet hd 189733b. *The Astrophysical Journal*, 786 :22, 2014.
 - [107] Y. Moudden, J.F. Cardoso, J.L. Starck, and J. Delabrouille. Blind component separation in wavelet space. application to cmb analysis. *EURASIP Journal on Applied Signal Processing*, page 2437–2454, 2005.
 - [108] S. Moussaoui, D. Brie, and J. Idier. Non-negative source separation : range of admissible solutions and conditions for the uniqueness of the solution. *IEEE International Conference ICASSP*, pages 289–292, 2005.
 - [109] S. Moussaoui, D. Brie, A. Mohammad-Djafari, and C. Carteret. Separation of non-negative mixture of non-negative sources using a bayesian approach and mcmc sampling. *IEEE Transactions on Signal Processing*, page 4133–4145, 2006.
 - [110] W. Naanaa and J.M. Nuzillard. Extreme direction analysis for blind separation of nonnegative signals. *Signal Processing*, pages 254–267, 2017.
 - [111] J.M.P. Nascimento and J.M. Bioucas-Dias. Does independent component analysis play a role in unmixing hyperspectral data ? *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, page 175–187, 2005.
 - [112] J.M.P. Nascimento and J.M. Bioucas-Dias. Vertex component analysis : A fast algorithm to unmix hyperspectral data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, page 898–910, 2005.
 - [113] D. Nuzillard and A. Bijaoui. Blind source separation and analysis of multispectral astronomical images. *Astronomy and Astrophysics Suppl.*, pages 129–138, 2000.
 - [114] W.S.B. Ouedraogo, A. Souloumiac, M. Jaidane, and C. Jutten. Non-negative blind source separation algorithm based on minimum aperture simplicial cone. *IEEE Transactions on Signal Processing*, pages 376–389, 2014.
 - [115] P. Paatero. Least squares formulation of robust non-negative factor analysis. *Chemo-metrics and Intelligent Laboratory Systems*, page 23–35, 1997.
 - [116] P. Paatero and U. Tapper. Positive matrix factorization : A non-negative factor model with optimal utilization of error estimates of data values. *Environmetrics*, page 111–126, 1994.
 - [117] G. Patanchon, J.F. Cardoso, J. Delabrouille, and P. Vielva. Cosmic microwave background and foregrounds in wilkinson microwave anisotropy probe first-year data. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 364 :1185–1194, 2005.
 - [118] D.-T. Pham. Blind separation of instantaneous mixture of sources via the gaussian mutual information criterion. In *Proceedings of EUSIPCO*, page 3–6, 2000.
 - [119] D.-T. Pham and J.-F. Cardoso. Blind separation of instantaneous mixtures of non stationary sources. *IEEE Transactions on Signal Processing*, pages 1837–1848, 2000.

- [120] D.-T. Pham and P. Garat. Blind separation of mixtures of independent sources through a quasi maximum likelihood approach. *IEEE Transactions on Signal Processing*, page 1712–1725, 1997.
- [121] D.T. Pham, C. Servière, and H. Boumaraf. Blind separation of speech mixtures based on nonstationarity. In *Symposium on Signal Processing and its Applications (ISSPA)*, page 73–76, 2003.
- [122] M. Puigt. *Méthodes de séparation aveugle de sources fondées sur des transformées temps-fréquence*. PhD thesis, Université Paul Sabatier Toulouse 3, 2007.
- [123] Y. Qian, S. Jia, J. Zhou, and A. Robles-Kelly. Hyperspectral unmixing via $l_{1/2}$ sparsity-constrained nonnegative matrix factorization. page 4282–4297, 2011.
- [124] M. Rezaei, R. Boostani, and M. Rezaei. An efficient initialization method for nonnegative matrix factorization. *Journal of Applied Science*, page 354–359, 2011.
- [125] S. Rickard, T. Melia, and C. Fearon. Desprit-histogram based blind source separation of more sources than sensors using subspace methods. *IEEE Workshop on Applications of Signal Processing to Audio and Acoustics*, pages 5–8, 2005.
- [126] S. Rickard and O. Yilmaz. On the approximate w-disjoint orthogonality of speech. *IEEE International Conference ICASSP*, page 529–532, 2002.
- [127] J. Rosca, C. Borss, and R. Balan. Generalized sparse signal mixing model and application to noisy blind source separation. *IEEE International Conference ICASSP*, pages 877–880, 2004.
- [128] H. Saylani, Y. Deville, S. Hosseini, and M. Habibi. A multi-tag radio-frequency identification system using new blind source separation methods based on spectral decorrelation. *Physical and Chemical News*, page 31–42, 2007.
- [129] H. Snoussi, G. Patanchon, J.F. Macias-Perez, A. Mohammad-Djafari, and J. Delabrouille. Bayesian blind component separation for cosmic microwave background observations. In *the MAXENT international workshop*, 2001.
- [130] A. Taleb and C. Jutten. Source separation in post-nonlinear mixtures. *IEEE Transactions on Signal Processing*, pages 2807–2820, 1999.
- [131] S. Theodoridis and K. Koutroumbas. *Pattern Recognition*. Academic Press, 2009.
- [132] A.G.G.M. Tielens. *The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium*. Cambridge, 2005.
- [133] L. Tong, R-W. Liu, V.C. Soon, and Y-F. Huang. Indeterminacy and identifiability of blind identification. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, pages 499–509, 1991.
- [134] R. Vigário, J. Särelä, V. Jousmäki, M. Hämmäläinen, and E. Oja. Independent component analysis approach to the analysis of eeg and meg recordings. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, pages 589–593, 2000.
- [135] E. Vincent, R. Gribonval, and C. Fevotte. Performance measurement in blind audio source separation. *IEEE Transactions on Audio, Speech, and Language Processing*, pages 1462–1469, 2006.
- [136] I.P. Waldmann, G. Tinetti, P. Deroo, M.D.J. Hollis, S.N. Yurchenko, and J. Tennyson. Blind extraction of an exoplanetary spectrum through independent component analysis. *The Astrophysical Journal*, 766 :7, 2013.

- [137] J. Wang and C.I. Chang. Applications of independent component analysis in end-member extraction and abundance quantification for hyperspectral imagery. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, pages 2601–2616, 2006.
- [138] S. Wild, J. Curry, and A. Dougherty. Improving non-negative matrix factorizations through structured initialization. *Pattern Recognition*, pages 2217–2232, 2004.
- [139] M.E. Winter. N-findr : an algorithm for fast autonomous spectral end-member determination in hyperspectral data. *SPIE conference on Imaging Spectrometry*, page 266–275, 1999.
- [140] O. Yilmaz and S. Rickard. Blind separation of speech mixtures via time-frequency masking. *IEEE Trans. on Signal Processing*, page 1830–1847, 2004.
- [141] V. Zarzoso and A.-K. Nandi. Noninvasive fetal electrocardiogram extraction : blind source separation versus adaptive noise cancellation. *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, pages 12–18, 2001.
- [142] R. Zdunek and A. Cichocki. Fast nonnegative matrix factorization algorithms using projected gradient approaches for large-scale problems. *Computational Intelligence and Neuroscience*, pages 1–13, 2008.